

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Departamento de Física de Materiales



**TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y LOCALIZACIÓN EN
HETEROESTRUCTURAS DE SEMICONDUCTORES**

**MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR POR**

Ignacio Gómez Cuesta

Bajo la dirección del Doctor:

Francisco Domínguez-Adame Acosta

Madrid, 2004

ISBN: 978-84-669-1738-4

©Ignacio Gómez Cuesta, 2003

Universidad Complutense de Madrid

Departamento de Física de Materiales

Tesis Doctoral



**TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y
LOCALIZACIÓN EN HETEROESTRUCTURAS
DE SEMICONDUCTORES**

Ignacio Gómez Cuesta
Enero 2003

Dirigida por el
Dr. Francisco Domínguez-Adame Acosta

A mi familia.

Agradecimientos

En primer lugar me gustaría agradecer a Francisco Domínguez-Adame, director de esta tesis doctoral, su ayuda y amistad a lo largo de los casi cinco años durante los cuales hemos trabajado juntos. Francisco ha resultado durante todo este tiempo un modelo tanto desde el punto de vista profesional, como desde el punto de vista personal.

Por otro lado, no quisiera olvidarme de algunas personas con las que he trabajado a lo largo de los últimos años, sin cuya colaboración este trabajo no hubiera sido posible. En primer lugar debo nombrar a Enrique Díez quien, junto con Francisco, ha sido la persona que más me ha ayudado a llevar esta tesis a buen fin, y con quien he compartido amistad y algunos buenos momentos cuando fuimos compañeros de despacho. Por otro lado no debo olvidarme de Pedro Orellana, a quien estoy especialmente agradecido por su amistad y hospitalidad (la suya y la de su maravillosa familia) durante mis dos visitas a la Universidad Católica del Norte en Antofagasta. Finalmente quisiera agradecer a Vittorio Bellani por su ayuda y por los buenos momentos pasados en Pavía, especialmente por aquel inolvidable sábado en el techo de Europa. Otras personas con las que he colaborado y que han sido de inestimable ayuda para la realización de esta tesis han sido Indu Satija, Natalia Malkova, y Ara Sedrakyan.

Un agradecimiento especial debe ir dirigido a aquellos que han tenido

que soportarme —realmente tiene mérito— compartiendo despacho conmigo. Particularmente duro (y por eso le estaré eterna, sincera y afectuosamente agradecido) ha sido lo de Ana Urbietta que no ha podido evitar tener que aguantarme durante más de cuatro años: ¡pobre!. Recuerdo con agrado y algo de nostalgia los primeros años en la ‘comuna’ con Victor, Mario, Emilio, Enrique, Manuel y Francesco. Y no con menos agrado los últimos tiempos junto a Agustina y Pedro.

Durante los últimos años he pasado muy buenos ratos con un montón de compañeros en el Departamento con los que he compartido tiempo y espacio físico. Con especial agrado recuerdo los muchos cafés y comidas pasados junto a Enrique, Paloma, Bianchi, Carlos Díaz-Guerra y Ana Cremades. Y no con menos agrado me acuerdo de otros momentos pasados junto a Lucas, Oscar de Abril, Oscar Rodríguez, Rocío, Andrei, Javi, Micky, Ester, Carlos Romero y Fernando.

Finalmente me gustaría agradecer a mi familia (padres, hermana, tíos, tías, abuelos, —y a Marta, aunque ella no quiera—), por el apoyo que me han prestado y por haber estado siempre ahí. Me gustaría, además, tener un recuerdo especial con Vicenta, que ya no está aquí, y a la que estoy seguro que hubiera ilusionado ver este momento.

Madrid, Enero de 2003

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Heteroestructuras de semiconductores	1
1.2. Transporte electrónico	2
1.3. Desorden	4
1.4. Localización	5
1.5. Objetivos y organización de la tesis	6
2. Transporte electrónico y localización	9
2.1. Electrones en heteroestructuras	9
2.1.1. Aproximación de la masa efectiva.	10
2.1.2. Hamiltoniano de Ben Daniel-Duke	13
2.1.3. Modelo de dos bandas	15
2.2. Conductancia: la fórmula de Landauer	16
2.3. Sistemas desordenados	18
2.3.1. Localización de Anderson	18
2.3.2. Desorden correlacionado	20
2.4. Caracterización del desorden	21
2.4.1. Coeficiente de Lyapunov	22
2.4.2. Análisis multifractal	24
3. Heteroestructuras con modulación de composición	27
3.1. Introducción	27

3.2. Transporte y estructura electrónica	30
3.2.1. Coeficiente de transmisión	31
3.2.2. Efectos del desorden	35
3.2.3. Característica $j - V$	43
3.2.4. Interacción electrón-electrón: experimentos de PL	47
3.2.5. Modelo discreto	54
3.3. Conductancia	62
3.3.1. Transición metal-aislante	63
3.4. Conclusiones	71
4. Heteroestructuras con desorden intencionado	73
4.1. Introducción	73
4.2. Aleaciones binarias	75
4.2.1. Condición de existencia de estados extendidos	77
4.2.2. Longitud de localización	79
4.2.3. Resultados numéricos	81
4.3. Superredes con desorden correlacionado	85
4.3.1. Condición de existencia de estados extendidos	87
4.3.2. Resultados numéricos	90
4.4. Superredes binarias con desorden correlacionado	93
4.4.1. Estados extendidos	95
4.4.2. Resultados numéricos	97
4.5. Conclusiones	101
5. Heteroestructuras con desorden no intencionado	105
5.1. Introducción	105
5.2. Modelo de transporte	106
5.2.1. Conductancia	113
5.2.2. Corriente eléctrica	114
5.3. Dobles barreras con desorden en las intercaras	116
5.3.1. Desorden lateral	118
5.3.2. Desorden composicional	127
5.4. Puntos cuánticos autoensamblados	129
5.4.1. Desorden configuracional y morfológico	130
5.4.2. Destrucción de la minibanda	132
5.5. Conclusiones	138

6. Localización en heteroestructuras magnéticas	141
6.1. Introducción	141
6.2. Modelo de dos bandas	145
6.3. Uniones magnéticas invertidas	147
6.4. Uniones magnéticas normales	151
6.5. Espín	154
6.6. Conclusiones	156
 7. Conclusiones	 159
 A. Relaciones de dispersión en uniones magnéticas	 165
A.1. Unión magnética invertida	165
A.2. Unión magnética normal	168

CAPÍTULO 1

Introducción

1.1. Heteroestructuras de semiconductores

Aunque el uso de materiales semiconductores para aplicaciones electrónicas se remonta a mediados de este siglo, en la década de los 50, no fue hasta principios de los años 70, con el trabajo pionero de Esaki y Tsu [1]¹, cuando surgió la idea de construir estructuras artificiales de estos materiales. En el contexto del desarrollo de la tecnología de los semiconductores, las heteroestructuras surgieron con la finalidad de diseñar dispositivos en los que fuese posible tener un cierto control sobre sus propiedades ópticas y electrónicas, es decir, en cierto modo, poder diseñar dispositivos electrónicos *a la carta*.

En cualquier caso, en una primera etapa de desarrollo de las heteroestructuras de semiconductores los éxitos obtenidos no fueron muy numerosos debido, en parte, a la falta de control sobre las imperfecciones inherentes a los procesos de crecimiento de los distintos materiales. Los primeros éxitos vinieron con la fabricación de láseres de inyección [2] a

¹Todas las referencias de esta memoria se recogen en una única sección que comienza en la página 171.

partir de heterouniones de GaAs-AlGaAs, que fueron crecidas mediante la técnica de epitaxia en fase líquida (LPE).

Todo el interés por construir heteroestructuras reside en el hecho de que, a pesar de lo complicado del proceso de crecimiento, haciéndolo uno es capaz de manipular el comportamiento de electrones y huecos mediante lo que se ha dado en llamar *ingeniería de bandas* [3,4]. Con el desarrollo de las distintas técnicas epitaxiales de crecimiento de superficies a mediados de los 70, en particular de la deposición química de vapores (CVD) y de la epitaxia por haces moleculares (MBE), comenzó a surgir una nueva tecnología basada en el diseño de diferentes tipos de heteroestructuras artificiales. Diodos emisores de luz, transistores bipolares, transistores de efecto campo, láseres de cascada, etc. han ido apareciendo, y sus propiedades se han visto mejoradas merced al empuje realizado, tanto desde el punto de vista tecnológico como desde el punto de vista de la mejor comprensión teórica de la física de estos sistemas [5].

Sin embargo, las heteroestructuras de semiconductores no son sólo interesantes desde un punto de vista aplicado. La posibilidad de jugar con su dimensionalidad a la hora de confinar los portadores de carga en cero, una, y dos dimensiones, hace de las heteroestructuras una excelente herramienta para estudiar los más diversos fenómenos físicos [6]. Así, se han usado superredes (SRs en adelante), pozos cuánticos, barreras dobles, etc. para investigar, desde un punto de vista fundamental, diversos fenómenos como el efecto Hall cuántico [7], la localización en sistemas desordenados y la transición metal-aislante [8].

1.2. Transporte electrónico

Sorprendentemente, no se desarrolló una teoría unificada y comúnmente aceptada del transporte electrónico en sistemas mesoscópicos —el formalismo de Landauer-Buttiker— hasta principios de la década de los ochenta. Los primeros intentos de construir esta teoría vinieron por par-

te de Rolf Landauer, quien en 1957 publicó un famoso artículo [9] en el que estudiaba el transporte de electrones en un sólido unidimensional desordenado. La fórmula de Landauer sufrió posteriores revisiones, principalmente debidas al hecho de que su demostración no estaba basada en la teoría de la respuesta lineal. El primero en revisar el trabajo de Landauer fue el Premio Nobel de Física P. W. Anderson [10] quien en 1980 consiguió una demostración rigurosa, aunque sólo en el caso unidimensional, de la fórmula de Landauer. Fisher y Lee [11] extendieron el trabajo de Anderson a más de una dimensión, considerando un sistema de N canales, y Engquist y Anderson [12] en un nuevo trabajo, recuperaron la fórmula inicial de Landauer, poniendo de manifiesto la importancia de los contactos en la teoría del transporte. Finalmente, entre 1985 y 1988 los trabajos de Büttiker [13–15] proporcionaron una extensión unificada de la fórmula de Landauer al caso de varios canales, y una comprensión mucho mayor de qué es lo que realmente se obtiene cuando se intenta medir una resistencia.

El desarrollo de la teoría del transporte electrónico en sistemas mesoscópicos ha posibilitado en los últimos años el estudio de las propiedades electrónicas de muy diversos dispositivos. En particular se ha construido e investigado un sinnúmero de distintas estructuras artificiales, SRs, pozos, hilos, puntos cuánticos, nanotubos, etc., con la finalidad de diseñar dispositivos optoelectrónicos para diferentes aplicaciones tecnológicas. En este sentido, una de las contribuciones de esta tesis será el estudio del transporte electrónico en un nuevo tipo de SRs, las llamadas SRs gaussianas (SRGs en adelante), que como se verá, constituyen un buen candidato para diseñar filtros pasa banda para aplicaciones como, por ejemplo, el láser de cascada.

1.3. Desorden

Tras el desarrollo de la teoría, el transporte electrónico en heteroestructuras de semiconductores se ha investigado de forma extensiva en las últimas dos décadas. El transporte electrónico en presencia de campos magnéticos, o de campos eléctricos aplicados, da lugar a fenómenos como el efecto Hall cuántico [7], las oscilaciones de Bloch [16], el efecto túnel resonante, etc. que han recibido, y siguen haciéndolo, intensos esfuerzos para su mejor comprensión. En particular se han dedicado grandes esfuerzos a estudiar los mecanismos de pérdida de coherencia en estos sistemas. Un ejemplo de esto son los trabajos teóricos de Domínguez-Adame *y col.* [] acerca de la pérdida de coherencia en las oscilaciones de Rabi observadas en SRs de semiconductores. Los mecanismos de pérdida de coherencia son muy diversos, siendo uno de ellos la dispersión electrónica debido a la presencia en las heteroestructuras de *desorden* no intencional en forma de impurezas o de rugosidad en las intercaras de los distintos materiales que las componen. Un ejemplo de esto es la pérdida de coherencia en las oscilaciones de Rabi en SRs de semiconductores predicha teóricamente por Domínguez-Adame *y col.* [102]. Otras fuentes de desorden pueden ser la falta de periodicidad de los elementos que componen la heteroestructura como sucede, por ejemplo, en las matrices de puntos cuánticos autoensamblados. Una parte importante de esta tesis está dedicada precisamente al estudio de los efectos que este tipo de desorden no intencionado tiene sobre algunas heteroestructuras. En este sentido, la teoría de las propiedades electrónicas de los sólidos desordenados ha madurado considerablemente durante las dos últimas décadas. En parte, esta mejora en la comprensión del desorden ha sido debida a la disponibilidad de nuevos métodos teóricos, así como a la aparición de mayores y más rápidos ordenadores que facilitan la tarea de estudiar numéricamente la complejidad de estos sistemas. Por otro lado, la mejora en las técnicas de crecimiento epitaxial a las que ya nos hemos referido, así como

la aparición de nuevas técnicas, han hecho posible la realización de test experimentales de los resultados teóricos existentes. Una de las mayores contribuciones de este trabajo es el desarrollo de una técnica numérica para el estudio del efecto de la rugosidad en el transporte en heteroestructuras de doble barrera. Este método, asimismo, será de utilidad para el estudio del efecto del desorden en la estructura electrónica y propiedades de transporte de matrices desordenadas de puntos cuánticos.

1.4. Localización

El ingrediente esencial en la descripción de sistemas electrónicos desordenados, como las heteroestructuras de semiconductores desordenadas, es el concepto de localización. El concepto básico de localización fue introducido por Anderson. En 1958 Anderson [17] señaló que la función de onda en un sólido desordenado tridimensional resultaría exponencialmente localizada en el espacio para valores suficientemente grandes del desorden. Este hallazgo le valió la concesión del Nobel en 1977. En el caso del modelo de Anderson en sistemas de baja dimensionalidad, Mott y Twose [18], posteriormente a éste, demostraron rigurosamente la singular propiedad de que, con independencia del grado de desorden del sistema, *todos* los estados están localizados en una y dos dimensiones. Más tarde otros autores, extendieron la demostración de esta propiedad a diversos modelos distintos a la propuesta original de Anderson. De esta forma se extendió en la comunidad científica la idea de que un sistema unidimensional desordenado no podía tener estados extendidos, lo que se vino en llamar como *principio* de localización de Anderson.

Sin embargo esta imagen tradicional se vino abajo fundamentalmente a raíz del trabajo publicado por Dunlap [19] *y col.*, en el que el desorden en un modelo de tipo *enlace fuerte* presentaba correlaciones de corto alcance de tipo dimérico. Este modelo conocido como *random dimer* resultó presentar una fenomenología completamente distinta al de-

sorden tradicional sin correlaciones de ningún tipo en sistemas unidimensionales, dado que en él aparecen estados extendidos que pueden tener importancia para el transporte. En una serie de trabajos posteriores Wu y Phillips [20, 21], utilizando el modelo *random dimer*, presentaron una posible explicación a las buenas propiedades conductoras que presentan algunos polímeros desordenados tras ser dopados, como la polianilina. Sin embargo, los polímeros constituyen un sistema en el que es muy difícil asegurar cómo es el desorden que presentan y, por tanto, estos trabajos no se aceptaron como una prueba experimental de la violación del *principio* de localización de Anderson. En años posteriores se han dedicado grandes esfuerzos a la comprensión de cómo afectan las correlaciones en el desorden a la aparición de estados extendidos en sistemas desordenados. En particular, Bellani *y col.* [22] han encontrado la primera evidencia experimental, mediante el empleo de SRs semiconductoras, de que correlaciones de tipo espacial en el desorden inhiben la localización de estados en sistemas desordenados de baja dimensionalidad. Una de las contribuciones de esta tesis será la aplicación de una nueva técnica analítica al estudio de estados extendidos en SRs desordenadas con desorden correlacionado, encontrando la aparición de estados extendidos para distintos tipos de desorden.

1.5. Objetivos y organización de la tesis

A lo largo de las anteriores líneas hemos realizado una muy breve introducción al transporte electrónico en las heteroestructuras fabricadas con materiales semiconductores y a la física del desorden. Estos dos temas son el pilar básico de esta tesis desde tres puntos de vista distintos.

Por un lado, estamos interesados en las propiedades de transporte electrónico en si de heteroestructuras como las SRs. En este sentido hemos investigado una nueva clase de heteroestructuras, las antes citadas SRGs, tanto en lo que se refiere a su estructura electrónica, como en lo

que se refiere a sus propiedades de transporte. Además hemos investigado la estructura electrónica y la localización en heterouniones magnéticas en semiconductores con intervalo estrecho de energías prohibidas.

Por otro lado, nos hemos ocupado del efecto que el desorden no intencional, inevitable en todo proceso de crecimiento de heteroestructuras, tiene sobre el transporte electrónico en éstas. Así, hemos estudiado el transporte tanto en heteroestructuras de doble barrera como en SRs de puntos cuánticos autoensamblados.

Finalmente nos hemos ocupado de la aparición de estados extendidos en sistemas unidimensionales desordenados, con desorden de tipo correlacionado. Al respecto, hemos dirigido nuestro interés hacia la investigación de los estados electrónicos en SRs donde se introduce desorden intencionado en alguno de los parámetros estructurales que definen estas heteroestructuras.

La presente tesis estará organizada de la siguiente manera:

- En el capítulo **segundo** haremos una breve introducción a la descripción de los estados electrónicos en heteroestructuras semiconductoras, así como a la teoría del transporte electrónico en sistemas mesoscópicos. También se hace una presentación de los fenómenos de localización en sistemas desordenados y se describen algunas técnicas empleadas para caracterizar el desorden.
- El capítulo **tercero** está dedicado al estudio de las SRGs, tanto desde el punto de vista de la estructura electrónica como desde el punto de vista del transporte. Compararemos nuestros resultados teóricos con algunos resultados experimentales existentes. Finalmente estudiaremos un modelo de transición metal-aislante que puede ser investigado experimentalmente en SRGs.
- El **cuarto** capítulo lo dedicaremos al estudio de estados extendidos en SRs con desorden intencional correlacionado. Utilizaremos para

ello una técnica analítica que inicialmente probaremos en el estudio de los estados electrónicos de una aleación binaria.

- En el capítulo **quinto** describiremos una técnica numérica que hemos desarrollado para estudiar el transporte electrónico en heteroestructuras de tipo doble barrera e investigar el efecto de la rugosidad en las intercaras, así como del desorden composicional, sobre magnitudes como la corriente y la conductancia. Por otro lado, también aplicaremos esta técnica para analizar el transporte en matrices de puntos cuánticos autoensamblados con un cierto grado de desorden en la forma y la posición de los puntos.
- El **sexto** capítulo lo dedicaremos al estudio de las funciones de onda y las propiedades de espín de los estados electrónicos en heterouniones magnéticas de tipo normal e invertido en semiconductores de intervalo estrecho de energías prohibidas.
- Finalmente en el capítulo **séptimo** concluye la memoria un resumen de los principales resultados y conclusiones de nuestro trabajo.

CAPÍTULO 2

Transporte electrónico y localización

El propósito de este capítulo es presentar brevemente una introducción a la física del transporte electrónico en heteroestructuras de semiconductores, y a la física del desorden en esta clase de sistemas. Comenzaremos con una somera discusión de la aproximación de la masa efectiva aplicada al estudio de la estructura electrónica en heterouniones, seguida de una sección dedicada al cálculo de la conductividad, concluyendo el capítulo con una introducción a la física del desorden en la que se exponen, sucintamente, algunas técnicas para cuantificar dicho desorden.

2.1. Electrones en heteroestructuras

Las actuales técnicas de crecimiento por MBE permiten conseguir que la superficie de separación entre dos semiconductores integrantes de una heteroestructura sufra sólo alteraciones del orden de una monocapa de un punto a otro de la misma, es decir, que sea altamente plana. Esta característica es muy importante, ya que permite simplificar la descrip-

ción del movimiento de los portadores en el plano normal a la dirección de crecimiento. Para simplificar el estudio de la estructura electrónica en heteroestructuras acudiremos al concepto de *unión plana y abrupta*. Con este término significamos una heterounión perfectamente plana en la que no existe interdifusión, es decir, aquella en la que a cada lado de la unión sólo existen átomos correspondientes a un mismo semiconductor.

El estudio de la estructura electrónica en heteroestructuras suele hacerse a partir de la aproximación de la masa efectiva [23–25]. Aunque esta aproximación tiene sus limitaciones y no siempre es justificado realizarla, se ha mostrado como un método sencillo y bastante exacto en muchos casos de interés. La aproximación de la masa efectiva describe una situación en la que electrón experimenta la acción de un potencial, cuyo origen se debe al desajuste de las bandas de conducción de ambos semiconductores, cuando se acerca a la heterounión.

Como es natural, no sólo existe un desajuste en la banda de conducción en la heterounión, sino que también está presente en la banda de valencia. Dependiendo de cómo se alinean las bandas de conducción y de valencia [26], las heteroestructuras pueden ser clasificadas en tres tipos distintos (heteroestructuras de tipo I, de tipo II y de tipo III), como puede verse en la figura 2.1.

2.1.1. Aproximación de la masa efectiva.

Como hemos avanzado, la forma más simple de tratar los estados electrónicos en una heteroestructura de semiconductores es mediante la aproximación de la masa efectiva, basada en desarrollar la función de onda electrónica en términos de las funciones de onda de Bloch en cada uno de los semiconductores que componen la heteroestructura.

Vamos a considerar el caso de una heterounión formada por dos semiconductores que llamaremos A y B. La generalización de los resultados a otras heteroestructuras más complejas, como barreras dobles, SRs, etc.

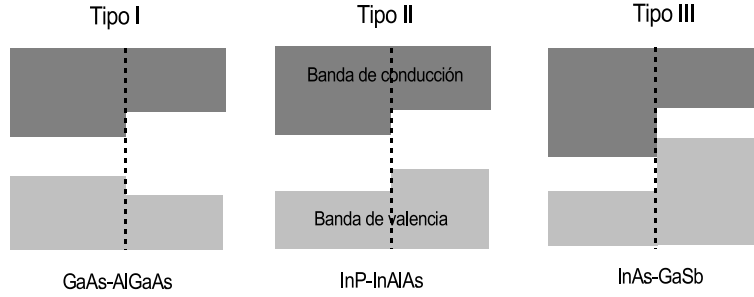


Figura 2.1. Esquema mostrando los tres tipos distintos de heteroestructuras, en función de la alineación las bandas de conducción y de valencia. Se indica también un ejemplo de cada una de ellas.

es inmediata. Si suponemos que las funciones periódicas de Bloch son iguales en los semiconductores A y B (lo que es válido en casi todos los compuestos III-V directos cerca del punto Γ ; véase [27] para una discusión detallada), podemos escribir las soluciones a la ecuación de Schrödinger en la heterounión, $\Psi(\mathbf{r})$, como sigue

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_n \psi_n^A(\mathbf{r}) U_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0), & \text{en A} \\ \sum_n \psi_n^B(\mathbf{r}) U_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0), & \text{en B} \end{cases} \quad (2.1)$$

donde $U_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0)$ son las funciones de onda de Bloch en la banda n y \mathbf{k}_0 es el punto de la zona de Brillouin en el que se construyen los estados electrónicos. Si consideramos que z es la dirección de crecimiento de la heterounión y que, como anticipamos, existe simetría translacional en el plano normal a esta dirección, podemos escribir las funciones $\psi_n^A(\mathbf{r})$ y $\psi_n^B(\mathbf{r})$ como sigue

$$\psi_n^{A,B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) \chi_n^{A,B}(z), \quad (2.2)$$

donde S es el área de la heterounión, y $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$ y $\mathbf{r}_\perp = (x, y)$. En lo sucesivo vamos a suponer que las funciones $\chi_n^{A,B}(z)$ varían lentamente

sobre distancias grandes comparadas con el parámetro de red, de manera que la función de onda electrónica será el producto de dos componenets, una función que varía rápidamente —las funciones de Bloch en cada uno de los semiconductores—, y una función que varía lentamente —la llamada función envolvente—. Para ulteriores cálculos tomaremos $\mathbf{k}_0 = 0$.

La ecuación de Schrödinger para la heterounión puede escribirse, con las hipótesis que hemos considerado, de la siguiente manera

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_A(\mathbf{r})\theta_A + V_B(\mathbf{r})\theta_B \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

donde θ_A es una función que toma el valor 1 si \mathbf{r} corresponde al material A y se anula en otro caso; análogamente se define θ_B . Multiplicando esta ecuación por la izquierda por $\Psi^*(\mathbf{r})$, e integrando a todo el espacio, llegamos a un sistema de N ecuaciones diferenciales acopladas

$$\mathcal{D}\chi = E\chi, \quad (2.4)$$

donde, por brevedad, hemos definido un vector χ cuyas N componentes son las funciones envolventes $\chi_n^{A,B}(z)$, y el operador diferencial \mathcal{D} es una matriz $N \times N$ cuyos elementos son

$$\begin{aligned} D_{nm} = & \left[E_n^A(\mathbf{0})\theta_A + E_n^B(\mathbf{0})\theta_B + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{nm} \\ & + \frac{\hbar \mathbf{k}_\perp}{m_0} \cdot \langle n | \mathbf{p}_\perp | m \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle n | p_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} \\ & - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial r_i} \frac{1}{M_{nm}^{ij}} \frac{\partial}{\partial r_j}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde M_{nm}^{ij} , con $i, j = x, y, z$, son los tensores de masa efectiva cuyas

componentes están dadas por

$$\frac{m_0}{M_{nm}^{ij}} = \frac{2}{m_0} \sum_{\nu} \frac{\langle n | p_i | \nu \rangle \langle \nu | p_j | m \rangle}{\langle E \rangle - E_{\nu}^A(\mathbf{0})\theta_A - E_{\nu}^B(\mathbf{0})\theta_B}, \quad (2.6)$$

habiendo definido

$$\langle n | \mathbf{p} | m \rangle = \int_{\omega} d^3r U_n^*(\mathbf{r}, \mathbf{0}) \mathbf{p} U_m(\mathbf{r}, \mathbf{0}). \quad (2.7)$$

Nótese que en este sistema de ecuaciones sólo hemos retenido los términos de segundo orden en \mathbf{p} , descartando los términos de orden superior. Es importante observar que el sistema de ecuaciones (2.4) tendría soluciones sencillas si se despreciaran los elementos de matriz $\langle n | \mathbf{p} | m \rangle$, dado que en ese caso sólo sería distinto de cero el término que multiplica la delta de Kronecker, es decir, las ecuaciones estarían desacopladas. Sin embargo, no en todas las situaciones es posible despreciar estos elementos de matriz que recogen la interacción entre las distintas bandas de los semiconductores, lo que complica indudablemente la solución.

2.1.2. Hamiltoniano de Ben Daniel-Duke

Quizá el modelo más sencillo para abordar el problema de la estructura electrónica en una heteroestructura de semiconductores es el llamado hamiltoniano de Ben Daniel-Duke. Esta aproximación proporciona resultados muy exactos en el caso de sistemas del tipo GaAs-Al_xGa_{1-x}As cuando la anchura de las barreras no es excesivamente pequeña, y los estados que se consideran son los más próximos al borde inferior de la banda de conducción más baja. En este modelo supondremos que, en ausencia de interacción espín-órbita, sólo hay contribución de términos diagonales al operador diferencial \mathcal{D} en la ecuación (2.4), de manera que los estados de la heteroestructura pueden construirse a partir de los estados de una única banda parabólica en cada uno de los distintos semiconductores y

la ecuación (2.4) queda como sigue

$$\left[V(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m(z)} \right] \chi(z) = E \chi(z). \quad (2.8)$$

Nótese que en esta expresión la masa efectiva $m(z)$ es dependiente de la posición. Esto es debido a que, a pesar de considerar sólo términos diagonales, el tensor de masa efectiva (2.6) ha de ser calculado a partir de términos cruzados de la banda considerada con el resto de bandas próximas. En el hamiltoniano de Ben Daniel-Duke, supondremos que la masa dependiente de la posición se escribe

$$m(z)^{-1} = m_0^{-1} + (M_{cc}^{zz})^{-1}, \quad (2.9)$$

donde M_{cc}^{zz} es una cantidad obtenida experimentalmente, de manera que las distintas bandas se suponen realmente desacopladas entre sí.

Las condiciones de contorno en las intercaras entre distintos semiconductores se reducen a la continuidad de las funciones

$$\chi(z) \text{ y } \frac{1}{m(z)} \frac{d\chi(z)}{dz}, \quad (2.10)$$

como puede comprobarse en la ecuación (2.8) integrando ésta en la región de transición de un material a otro. Por otro lado, las condiciones (2.10) garantizan la conservación de la corriente de probabilidad.

Por último, es importante señalar que el término proporcional a k_{\perp} , presenta al igual que el término $V(z)$ variaciones en forma de escalón debido a la discontinuidad de la masa efectiva. Sin embargo, su contribución suele ser pequeña en la mayor parte de los casos (por ejemplo en heteroestructuras de GaAs-AlGaAs o InP-InGaAs). Además suelen estudiarse los estados de conducción en el centro de la banda, cuando $k_{\perp} = 0$.

2.1.3. Modelo de dos bandas

Un refinamiento mayor en los cálculos de estructura electrónica en heteroestructuras pasa por considerar los efectos de interacción entre bandas próximas. En el llamado modelo de dos bandas, especialmente útil en el caso de semiconductores de intervalo estrecho de energías prohibidas, se incluyen los efectos de la banda de conducción y de la banda de valencia de huecos ligeros. Si denotamos por χ_c y χ_v las funciones envolventes asociadas a la banda de conducción y la banda de valencia respectivamente, entonces el operador \mathcal{D} en (2.5) tiene elementos de matriz

$$D_{nm} = [E_n^A(\mathbf{0})\theta_A + E_n^B(\mathbf{0})\theta_B] \delta_{nm} + (1 - \delta_{nm}) \left[\hbar \mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{v}_\perp - i\hbar v_z \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (2.11)$$

donde hemos despreciado el término de energía cinética $\hbar^2 \mathbf{k}^2/m_0$ que habitualmente suele ser pequeño, y hemos definido $\mathbf{v}_\perp = \langle c | \mathbf{p}_\perp | v \rangle / m_0$ y $v_z = \langle c | p_z | v \rangle / m_0$. En el caso particular en el que $\mathbf{k}_\perp = 0$, el sistema de ecuaciones (2.4) puede escribirse

$$\begin{pmatrix} E_g(z)/2 + V(z) - E & -i\hbar v_z \frac{\partial}{\partial z} \\ -i\hbar v_z \frac{\partial}{\partial z} & -E_g(z)/2 + V(z) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_c \\ \chi_v \end{pmatrix} = 0,$$

donde $E_g(z)$ es el intervalo de energías prohibidas y $V(z)$ es una función que describe la posición del centro del intervalo de energías prohibidas. Nótese que la ecuación (2.12) tiene la estructura formal de una ecuación de Dirac unidimensional para un electrón relativista.

En el caso más general en el que no hay necesariamente invariancia translacional en el plano normal al eje z se puede demostrar que la ecuación para la función envolvente en un modelo de dos bandas se puede reescribir como

$$\begin{pmatrix} E_g/2 + V - E & -iv(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ iv(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) & -E_g/2 + V - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_c \\ \chi_v \end{pmatrix} = 0,$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es un vector cuyas componentes son las matrices de Pauli, y v es el modulo del elemento de matriz inter-banda del operador velocidad \mathbf{p}/m_0 . Esta ecuación será de interés, como veremos, para calcular la estructura electrónica de heterouniones magnéticas en semiconductores masivos, en las que la aproximación de la función envolvente es útil para enlazar las soluciones en dos regiones entre las cuales el campo magnético presenta una discontinuidad.

2.2. Conductancia: la fórmula de Landauer

En 1957, Rolf Landauer publicó un famoso artículo [9] que completaría en 1970 [28], en el que presentaba un nuevo punto de vista sobre el transporte de electrones en un sistema unidimensional completamente desordenado. Landauer consideró el material como un complejo centro de dispersión sobre el que incide un flujo de cargas y, como fruto de esta interacción, aparece la resistividad del material; de esta forma, encontró que la conductividad a $T = 0$ de un conductor estrictamente unidimensional viene dada por

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{\tau}{1 - \tau}, \quad (2.12)$$

en donde τ es el coeficiente de transmisión del sistema. Esta fórmula fue, en su momento, sólo parcialmente aceptada. Por una lado, la ecuación no era obtenida utilizando la ampliamente aceptada teoría de la respuesta lineal, y por otro, una fórmula para el caso estrictamente unidimensional despertaba entonces poco interés en relación con los trabajos experimentales sobre fenómenos de transporte cuántico.

En 1980 Anderson *y col.* [10] abordaron una formulación rigurosa de la fórmula de Landauer extendiéndola al caso de varias dimensiones. Sin

embargo, sólo tuvieron éxito en el caso estrictamente unidimensional, con lo cual, a pesar del interés teórico de este trabajo, tuvo poco impacto en el ámbito experimental.

A continuación varios autores intentaron una revisión de la fórmula de Landauer en el caso unidimensional, así como su extensión a varias dimensiones (incluyendo canales de dispersión transversales) de forma que pudiese usarse en cálculos cuantitativos de las propiedades de transporte en sistemas reales. La propuesta de estos autores era utilizar la fórmula de Kubo basada en la teoría de la respuesta lineal. El primer resultado relevante fue obtenido por Economou y Soukoulis [29], quienes partiendo de la fórmula de Kubo obtuvieron para el caso unidimensional la fórmula

$$G = \frac{e^2}{h} \tau, \quad (2.13)$$

que contradecía la fórmula de Landauer (2.12). Poco después, Fisher y Lee [11] extendieron este resultado al caso de N canales, obteniendo la expresión

$$G = \frac{e^2}{h} \text{Tr} (tt^\dagger), \quad (2.14)$$

en la que t es la matriz de transmisión que conecta el flujo incidente en los diversos canales a un lado del centro dispersor con el flujo saliente en los canales del otro lado.

Observemos que la ecuación (2.13) no sólo contradice la ecuación de Landauer (2.12), sino que aparentemente contradice la intuición física, que nos dice que un conductor *perfecto* ($\tau = 1$) debería tener resistencia cero, y por tanto una conductividad infinita. Al contrario, la fórmula (2.13) predice que ese conductor perfecto tendría una resistencia h/e^2 . Esto hizo que dicha ecuación fuese considerada incorrecta por gran parte de la comunidad científica a pesar de no poder encontrarse ningún fallo substancial en los trabajos de Economou y Soukoulis.

Muy poco tiempo después del trabajo de Fisher y Lee, Engquist y

Anderson [12] abordaron de nuevo la ecuación de Landauer pero desde un punto de vista diferente. En vez de intentar sólo una derivación rigurosa a partir de la teoría de la respuesta lineal, su propósito fue acercarse a las condiciones reales en que son realizados los experimentos de transporte. Concretamente subrayaron que, en general, la corriente a través del circuito está controlada por una resistencia en serie con la muestra de interés. La caída de potencial en la muestra se mide añadiendo dos conexiones a ambos lados de la muestra, lo que se conoce como una medida de cuatro conexiones. Como resultado se recupera la fórmula de Landauer a temperatura cero, consiguiendo Engquist y Anderson además encontrar una expresión válida a temperatura finita

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \tau(E) dE}{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) [1 - \tau(E)] dE}, \quad (2.15)$$

donde las integrales se extienden a las bandas permitidas, $\tau(E)$ es el coeficiente de transmisión y f es la distribución de Fermi-Dirac. La fórmula de Landauer no fue totalmente aceptada hasta que Büttiker, en una serie de artículos publicados durante la década de los 80 [13–15], proporcionó una extensión unificada a la fórmula de Landauer para un número arbitrario de canales y contactos.

2.3. Sistemas desordenados

2.3.1. Localización de Anderson

En su trabajo pionero publicado en 1958 [17], P. W. Anderson utilizó un modelo de enlace fuerte para simular un sólido cristalino tridimensional. La energía de sitio en cada punto de la red es una variable aleatoria que toma valores sobre un cierto rango con una determinada

distribución de probabilidad. Desde un punto de vista matemático esto supone introducir desorden en los elementos diagonales del hamiltoniano, por lo que a este tipo de desorden se le suele conocer con el nombre de desorden diagonal. La conclusión principal de Anderson en su trabajo de 1958 fue que en un sistema físico todos los estados están localizados si la magnitud del desorden supera un determinado valor crítico que depende de la dimensión del sistema. Hablamos de un *estado localizado* cuando la probabilidad de encontrar al electrón en el sistema es relevante en una región limitada del espacio y esta probabilidad decrece (generalmente de manera exponencial) cuando nos alejamos de esta región.

El valor del desorden en que debería producirse la transición no ha podido ser calculado con rigor hasta la fecha en dimensión arbitraria. En 1969 J. Ziman [30] demostró que la transición dependía de la variable espectral, es decir, que con la introducción de desorden podemos encontrar el espectro dividido mediante dos frentes móviles que separan los estados localizados de los estados extendidos, deduciendo incluso una corrección a la estimación aproximada del valor del desorden crítico que había realizado Anderson. En el caso unidimensional es posible calcular el valor del desorden crítico, que resulta ser igual cero. Esto es tanto como decir que para cualquier cantidad de desorden, por pequeña que sea, todos los estados están localizados en sistemas unidimensionales. La primera demostración rigurosa de esta propiedad fundamental se debe a Mott y Twose [18]. Finalmente Matsuda e Ishii [31] extendieron esta demostración a numerosos modelos de desorden (todos ellos con desorden no correlacionado) con lo que establecieron la idea de que *estaba demostrado que para cualquier tipo y cantidad de desorden todos los estados están localizados en una dimensión* [32]. Un estudio extensivo acerca de localización puede encontrarse en la Ref. [33], y en particular en el artículo de Lee y Ramakrishnan [34], donde se presenta de manera detallada la teoría de *escala* desarrollada por Abrahams *y col.* [8]. Esta teoría de *escala* es el marco teórico estándar para el estudio de la localización en

sistemas electrónicos desordenados.

2.3.2. Desorden correlacionado

Como acabamos de mencionar, hasta finales de la década de los ochenta se pensaba que en un sistema unidimensional desordenado todos los estados están localizados. A pesar de que las demostraciones de esta afirmación eran dependientes del modelo, se consideraba que el 'principio' de localización de Anderson era un resultado completamente riguroso. Sin embargo, a mediados de 1990 Dunlap, Wu y Phillips [19] propusieron un modelo desordenado unidimensional que presentaba estados deslocalizados. El modelo, al que bautizaron con el nombre de *random dimer model* (RDM), es muy simple: para introducirlo, consideremos un modelo de enlace fuerte unidimensional en el que la energía de sitio solamente pueda tomar dos valores, ϵ_a y ϵ_b y la constante de acoplo entre sitios vale t en el caso de próximos vecinos y 0 en el resto. En el caso en que la secuencia de energías de sitio es desordenada, alternándose los valores de ϵ_a y ϵ_b de forma totalmente aleatoria, se cumplen las predicciones de la teoría de *escala*, estando todos los estados localizados. Sin embargo, si introducimos la condición de que una de estas energías se asigne aleatoriamente por parejas (*dímeros*) de la red, encontramos \sqrt{N} estados extendidos si se cumple la condición $|\epsilon_a - \epsilon_b| \leq 2t$, siendo N el número total de sitios. Por tanto, la fracción de estados extendidos decrece con el tamaño del sistema como $1/\sqrt{N}$.

El RDM presenta problemas de tipo conceptual, dado que no resulta claro si el *único* estado extendido que aparece en el modelo en el límite termodinámico —un conjunto de medida nula desde un punto de vista matemático—, es relevante para las propiedades de transporte en sistemas físicos reales. De hecho este modelo fue aplicado para describir un posible mecanismo de transporte en polímeros desordenados con propiedades conductoras sorprendentemente buenas como el polipirrol

y el poliparafenilo [20] o la polianilina [21], pero los resultados no fueron aceptados como una prueba indiscutible de transporte en un sistema desordenado unidimensional por dos razones fundamentales. Por un lado aparece una falta de control experimental a la hora de construir un polímero con una estructura espacial determinada, lo que hacía difícil concluir que realmente la estructura de estos polímeros presentaba un desorden de tipo RDM. Por otro lado, desde un punto de vista teórico, Stephens y Skinner [35] sugirieron que los efectos de deslocalización que introduce el desorden correlacionado desaparecen cuando se consideran los efectos tridimensionales siempre presentes en los polímeros citados, aunque esto último fue cuestionado por Domínguez-Adame *y col.* [36].

Durante la década de los 90 se publicaron un elevado número de trabajos teóricos dedicados a clarificar el papel que juegan los estados extendidos en sistemas desordenados con desorden correlacionado sobre las propiedades de transporte en dichos sistemas. En particular Domínguez-Adame *y col.* desarrollaron a lo largo de estos años una serie de trabajos dedicados a estudiar el transporte electrónico en SRs semiconductoras con desorden correlacionado [37–42], que concluyeron en 1999 con la publicación de la primera evidencia experimental de que correlaciones de tipo espacial en el desorden inhiben la localización de estados en sistemas desordenados de baja dimensionalidad [22].

2.4. Caracterización del desorden

Para introducir el concepto de estado extendido podemos recurrir a las soluciones a la ecuación de Schrödinger en un sólido cristalino infinito perfectamente periódico y sin ningún tipo de desorden. Estas soluciones, obtenidas mediante el teorema de Bloch, son perfectamente periódicas y tienen un momento bien definido, de manera que son autofunciones extendidas en todo espacio. Así, un electrón que ocupa un estado dado por una de estas soluciones puede estar con idéntica probabilidad en cada

uno de los átomos del cristal. Esto es lo que entendemos por un estado extendido. De forma análoga, llamamos estados localizados a los estados caracterizados por funciones de onda que toman valores distintos de cero únicamente en una región finita del espacio. Para estimar el tamaño de esta región se define la longitud de localización, como veremos.

Cuando consideramos la localización de estados en el sentido de Anderson, tal y como haremos en este trabajo en adelante, suponemos que las funciones de onda correspondientes a estados localizados son tales que al hacer estadística sobre distintas realizaciones se verifica que

$$\langle \psi(x)\psi(x') \rangle \sim \exp(-|x - x'|/\lambda). \quad (2.16)$$

En esta expresión llamaremos *longitud de localización* al parámetro λ , el cual ofrece una estimación del tamaño de la región espacial en la que se encuentra el electrón que ocupe estados descritos por este tipo de funciones de onda. Otra forma de estimar la longitud de localización es mediante el coeficiente de Lyapunov, magnitud mucho más conveniente desde el punto de vista numérico dado que tiene una relación muy sencilla con el formalismo de la matriz de transferencia.

En cualquier caso, independientemente de método empleado a la hora de estimar la longitud de localización, en un sistema finito nunca podremos decir con total certeza que un estado es completamente extendido. Para evitar en lo posible esta ambigüedad, emplearemos siempre diferentes formas de caracterizar el grado de localización de los estados, de manera que si bien ninguna de ellas es concluyente por si sola, al estudiarlas en conjunto podremos tener una imagen muy precisa del tipo de estado en cuestión.

2.4.1. Coeficiente de Lyapunov

El coeficiente de Lyapunov, $\Gamma(E)$, mide el ritmo de decrecimiento de la función de onda correspondiente al autoestado de energía E a lo

largo del sistema. Por consiguiente, su inverso, $1/\Gamma$, determina la longitud de localización de dicho estado. El coeficiente de Lyapunov puede ser definido de diversas formas, cada una de las cuales permite relacionarlo con otras magnitudes de interés. En concreto, es posible encontrar una relación directa entre el coeficiente de Lyapunov y la conductividad de Landauer a temperatura cero, utilizando la expresión de Kirkman y Pendry [43]

$$\Gamma(E) = -\frac{L}{2} \log \tau(E), \quad (2.17)$$

donde $\tau(E)$ es el coeficiente de transmisión y L es la longitud del sistema. Con esta definición del coeficiente de Lyapunov es posible reescribir la conductancia a temperatura cero en unidades de e^2/h como sigue

$$g(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{2\Gamma}{L}\right) - 1}. \quad (2.18)$$

Esta expresión es muy útil, pues la conductividad es una magnitud medible directamente en los experimentos, a diferencia del coeficiente de Lyapunov, y podemos extraer información sobre la longitud de localización de un estado determinando cómo escala la conductancia con el tamaño del sistema, lo cual es importante si se pretende realizar un experimento para comprobar la veracidad de los hallazgos teóricos. Como vemos, las expresiones que hemos presentado, tanto para el coeficiente de Lyapunov como para la conductancia a temperatura cero, e igualmente la conductancia a temperatura finita, se basan en el conocimiento del coeficiente de transmisión del sistema. Esto hace que, desde el punto de vista numérico, sean muy apropiadas pues en una dimensión podemos calcular mediante expresiones recurrentes exactas el coeficiente de transmisión para un potencial dado utilizando, por ejemplo, el formalismo de la matriz de transferencia.

2.4.2. Análisis multifractal

Las técnicas de análisis multifractal permiten determinar la estructura espacial de una determinada función a diferentes escalas. Estas técnicas fueron introducidas por Halsey *y col.* en 1986 [44]. Esencialmente el procedimiento consiste en estudiar cómo escalan con el tamaño del sistema los momentos asociados a la función en estudio, que en nuestro caso será el módulo al cuadrado de la función de onda. La definición habitual en el caso discreto de los distintos momentos es [45]

$$\mu_q(N) = \frac{\sum_{n=1}^N |\psi_n|^{2q}}{\left(\sum_{n=1}^N |\psi_n|^2\right)^q}, \quad (2.19)$$

con $q \neq 1$. Mediante los momentos descritos por la ecuación anterior es posible determinar un conjunto de dimensiones generalizadas, D_q , por medio del ajuste

$$\mu_q(N) \simeq N^{-(q-1)D_q}. \quad (2.20)$$

Para el caso de los estados localizados D_q tiende a cero para todo valor de q , mientras que para los estados extendidos es igual a la dimensión espacial del sistema.

El momento de segundo orden $\mu_2(N)$ corresponde a la inversa del cociente de participación (IPR) introducido por Canisius y van Hemmen en 1985 [46] y que se ha revelado como uno de los instrumentos más útiles para determinar el carácter extendido o localizado de un estado. Es fácil deducir de la expresión (2.19) que para un estado extendido el valor de la IPR tomará valores pequeños, del orden de $1/N$, mientras que para estados localizados la IPR tomará valores mayores cercanos a la unidad, que se alcanza en el caso límite en que la función de onda esté completamente localizada en un átomo.

Por último debemos señalar que es posible definir la IPR en el caso

continuo mediante la siguiente expresión

$$\text{IPR} = \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(z)|^4, \quad (2.21)$$

supuesto que la función de onda está correctamente normalizada. Cabe destacar que $(\text{IPR})^{-1}$ tiene una interpretación física muy clara: establece el tamaño de la región donde la función de onda tiene una amplitud apreciable. Por tanto, existe una relación directa con la longitud de localización de otras funciones de onda pues no se escoge una dependencia exponencial como la indicada en (2.16).

CAPÍTULO 3

Heteroestructuras con modulación de composición

3.1. Introducción

La idea de fabricar sólidos artificiales que den lugar a perfiles de potencial de formas arbitrarias se remonta a principios de la década de los 70. El trabajo pionero de Esaki y Tsu [1] hubiera sido de escasa utilidad sin un avance paralelo en la tecnología de crecimiento de heteroestructuras semiconductoras que, con el advenimiento de la MBE, ha hecho posible el nacimiento de la física de los sistemas de baja dimensionalidad y una nueva generación de dispositivos optoelectrónicos basados en la posibilidad de diseñar artificialmente su estructura electrónica.

Entre los dispositivos que pueden obtenerse a partir de una SR semiconductor, uno de especial interés sería un filtro pasa banda en energía de alta eficiencia, capaz de transmitir electrones situados en un cierto intervalo de energías seleccionable. Un dispositivo como éste podría utilizarse para muy diversas aplicaciones, siendo una de las más interesantes la posibilidad de fabricar un filtro útil para incrementar la eficiencia de

láseres de cascada [47,48]. En un láser de cascada el efecto láser es debido

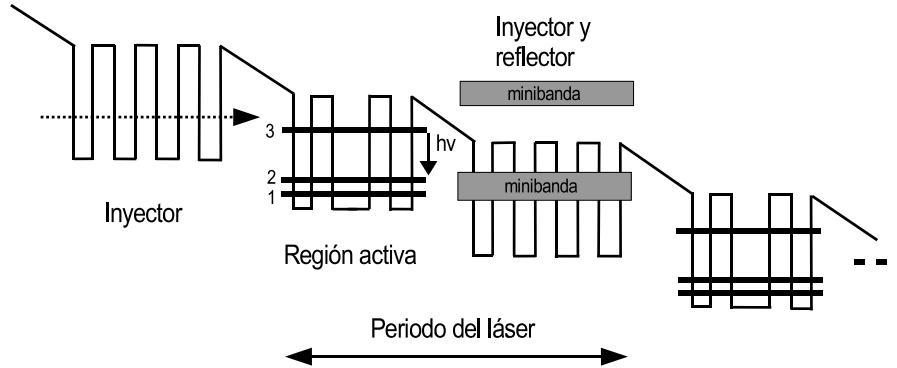


Figura 3.1. Esquema del perfil de la banda de conducción de una parte de un láser de cascada, mostrando las activa y de inyección reflexión. Para optimizar el diseño se crecen en serie varias regiones como la indicada en la figura con la etiqueta de ‘periodo del láser’.

a electrones que sufren transiciones entre las subbandas de conducción de una heteroestructura adecuada. En este tipo de láseres, un electrón confinado en la región activa emite un fotón al desexcitarse desde el nivel confinado de mayor energía al estado de menor energía; el electrón entonces abandona una región activa, mediante efecto túnel hasta la siguiente, donde el proceso radiativo se repite. La SR que sirve como sistema de inyección-relajación a ambos lados de la región activa debe servir como filtro pasa banda de energía para los electrones con energía igual a la del nivel más bajo, mientras que debe reflejar los electrones con energía igual a la del nivel más alto. Las regiones de inyección-relajación usadas normalmente sirven como filtros caracterizados por coeficientes de transmisión del orden de 10^{-1} en la banda y del orden de 10^{-4} en los intervalos de energía prohibida [49,50]. Es evidente que la eficiencia láser puede ser mucho mayor si el coeficiente de transmisión en la banda, y fuera de ella, pueden incrementarse y decrementarse respectivamente.

Tung y Lee [51] diseñaron por vez primera un filtro pasa banda ba-

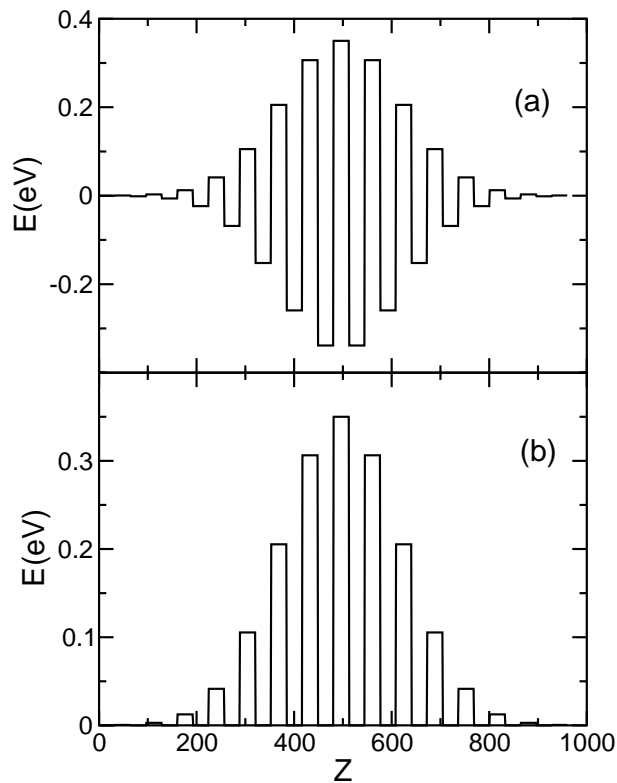


Figura 3.2. Perfil de la banda de conducción de la SRG propuesta por Tung y Lee (a), y de la SRG propuesta por Gómez *y col.* (b).

sado en SRs de GaAs-AlGaAs con modulación de composición. Estas heteroestructuras poseían un perfil de tipo gaussiano tanto en pozos como en barreras. Este diseño impone restricciones a la hora de controlar los parámetros estructurales de la SR para seleccionar la posición y anchura de las minibandas de conducción. Además debido a las elevadas fracciones de Al necesarias, una SR como esta crecida por MBE presentaría un número muy elevado de defectos. Posteriormente al trabajo de Tung y Lee, Gómez *y col.* [52] recuperaron la idea de los primeros proponiendo un nuevo diseño de filtro, la denominada SR gaussiana (SRG) que gracias a que sólo requería de modulación composicional en las ba-

rreras, permitía un crecimiento epitaxial más libre de defectos, además de mayores posibilidades de diseño (véase la figura 3.2). Más tarde, nuestros colaboradores del Paul Drude Institut crecieron un dispositivo de este tipo siguiendo nuestras indicaciones, que fue caracterizado ópticamente [53] encontrándose un buen acuerdo entre los cálculos teóricos de estructura electrónica y experimentos de fotoluminiscencia (PL) a baja temperatura llevados a cabo sobre las muestras crecidas. Además, otros trabajos se han dedicado al estudio del efecto del desorden no intencional sobre el transporte en las SRGs [54], así como al estudio de SRGs con barreras de tipo delta [55]. Por último, las SRGs se han propuesto como sistema útil para estudiar fenómenos de saturación en la transición metal-aislante [56]. A raíz de nuestros trabajos, otros autores han encontrado diseños alternativos que presentan propiedades similares a las de nuestro diseño [50].

3.2. Transporte y estructura electrónica

En esta sección nos proponemos estudiar la formación de minibandas en heteroestructuras semiconductoras de GaAs-Al_xGa_{1-x}As con modulación de composición de tipo gaussiano. Para ello vamos a analizar la estructura de la curva de transmisión en estos sistemas comparándola con la de una SR sin modulación de composición (SR uniforme). También pretendemos estudiar cómo las peculiares propiedades de las SRGs se ven afectadas por la existencia de desorden no intencionado. Obtendremos la curva de corriente frente a voltaje en el caso gaussiano, comparándolo con el caso uniforme y, discutiremos la importancia de los efectos de interacción a muchos cuerpos (interacción electrón-electrón) para explicar los espectros de PL observados experimentalmente en SRGs. Finalmente discutiremos un modelo discreto de SRG para cuyo estudio desarrollaremos una técnica de renormalización. Además vamos a mostrar que esta técnica es útil para investigar la transición localizado-deslocalizado en

algunos sistemas aperiódicos.

3.2.1. Coeficiente de transmisión

Nos proponemos calcular aquí el coeficiente de transmisión de SRs de GaAs-Al_xGa_{1-x}As. Para nuestros propósitos es suficiente estudiar los estados electrónicos más próximos al límite inferior de la banda de conducción, usando para ello la aproximación de la masa efectiva. Consideraremos en nuestro cálculo una masa efectiva dependiente de la posición que dé cuenta de la variación espacial de la fracción de Al a lo largo de la muestra (modulación de composición). Por otro lado, por simplicidad, consideraremos que los electrones tienen momento electrónico cero en el plano perpendicular a la dirección z —que es la de crecimiento—, de manera que la masa efectiva usada será la masa en el valle Γ . En la referencia [57] esta masa efectiva es $m_e^* = (0,067 + 0,083x)m_0$, siendo m_0 la masa electrónica, y en donde $x \leq 0,45$ es la fracción molar de Al. Con estas aproximaciones podemos escribir la ecuación de autovalores para las funciones electrónicas envolventes mediante un hamiltoniano de Ben Daniel-Duke como sigue

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{d}{m^*(z) dz} \right) + U(z) \right] \psi(z) = E \psi(z). \quad (3.1)$$

Aquí $U(z)$ es el perfil de la banda de conducción que viene dado por el desajuste entre los bordes de la banda de conducción entre GaAs y Al_xGa_{1-x}As. Para construir la función $U(z)$ en el caso de la SRG vamos a considerar que la altura de una barrera de Al_xGa_{1-x}As centrada en z_b está dada por $U_0 \exp(-z_b^2/\sigma^2)$ mientras que el fondo de cada pozo yace siempre a la misma energía, que consideraremos como origen, y que será la energía del borde de la banda de conducción en GaAs. Esto contrasta, como ya hemos anticipado, con el caso de la SRG propuesta por Tung y Lee [51], en la que tanto barreras como pozos se

construyen con $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ estando ambos modulados por una envolvente gaussiana. Desde un punto de vista aplicado, un dispositivo como el de Tung y Lee presenta peor calidad cristalográfica dado que son necesarias elevadas fracciones molares de Al para construirlo (y por tanto mayores temperaturas del sustrato), siendo además menor el rango en los parámetros estructurales con los que es posible jugar. En nuestros cálculos $U_0 = 0,36$ eV, la anchura de las barreras será de 1,5 nm y la de los pozos 6,2 nm, mientras que el parámetro σ es 28,875 nm. La longitud total de la SRG así construida es suficientemente pequeña para asegurar que el transporte electrónico tiene lugar en régimen balístico, como ha sido mostrado recientemente por Rauch *y col.* [58]. En esta referencia los autores encontraron que la longitud de coherencia en SRs uniformes de GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es de unos 150 nm. Si consideramos un número de barreras de $N = 15$, la longitud de nuestra SR es de unos 110 nm, de manera que podemos suponer que el transporte en los ejemplos que vamos a estudiar es coherente. La figura 3.3 muestra el perfil de la banda

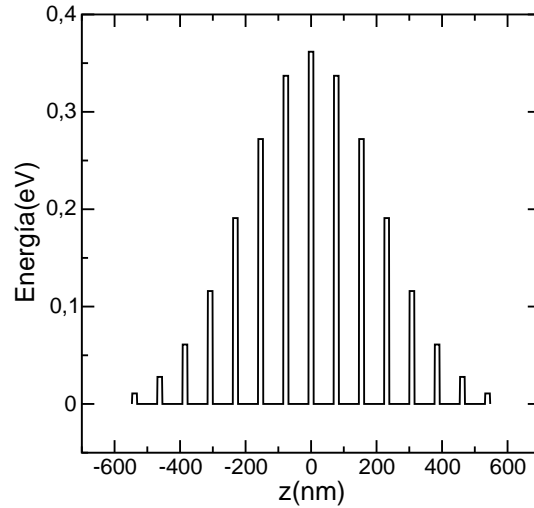


Figura 3.3. Perfil de la banda de conducción de una SRG construida con los parámetros estructurales usados en los cálculos.

de conducción correspondiente a estos valores para una SRG construida con los parámetros estructurales que hemos seleccionado.

Es posible relacionar los valores de la función envolvente a ambos lados de cualquier barrera, digamos la n -ésima, usando para ello la matriz de transferencia 2×2 $M(n)$, cuyos elementos pueden escribirse como $M_{11}(n) = M_{22}^*(n) \equiv \alpha_n$ y $M_{12}(n) = M_{21}^*(n) \equiv \beta_n$ [3, 40]. Si N es el número total de barreras, la matriz de transferencia completa de la heteroestructura puede escribirse a partir del producto $T(N) = M(N)M(N-1)\dots M(1)$. Ahora bien, es posible calcular el elemento $A_N = T_{11}(N)$ fácilmente usando la relación de recurrencia [40]

$$A_n = \left(\alpha_n + \alpha_{n-1}^* \frac{\beta_n}{\beta_{n-1}} \right) A_{n-1} - \left(\frac{\beta_n}{\beta_{n-1}} \right) A_{n-2}, \quad (3.2)$$

junto con las condiciones iniciales $A_0 = 1$ $A_1 = \alpha_1$. El conocimiento de A_N nos permite obtener el coeficiente de transmisión a una energía dada E , $\tau = |A_N|^{-2}$. Podemos observar en la figura 3.4(a) el coeficiente de transmisión calculado en función de la energía de los electrones incidiendo en la SRG desde uno de los contactos. Se observa la aparición de dos minibandas por debajo de la barrera más alta, a 0,35eV. Puede observarse también cómo el valor del coeficiente de transmisión es prácticamente 1 para todas las energías dentro de la minibanda. Esta característica es muy peculiar en esta clase de dispositivos dado que el número de barreras es muy pequeño. En el caso de una SR uniforme, es decir sin modulación de composición o de tipo Kronig-Penney, con los mismos parámetros estructurales, se observa también la presencia de dos minibandas, centradas en la misma energía, pero al contrario de lo que ocurría en el caso de la SRG, la probabilidad de transmisión ahora no es constante, sino que oscila fuertemente en función de la energía [ver figura 3.4(b)].

La interesante propiedad que acabamos de mostrar en el caso de las SRG hace de ellas un candidato óptimo como dispositivo de filtro pasa banda en energías, ya que su transmitividad, y por extensión su conduc-

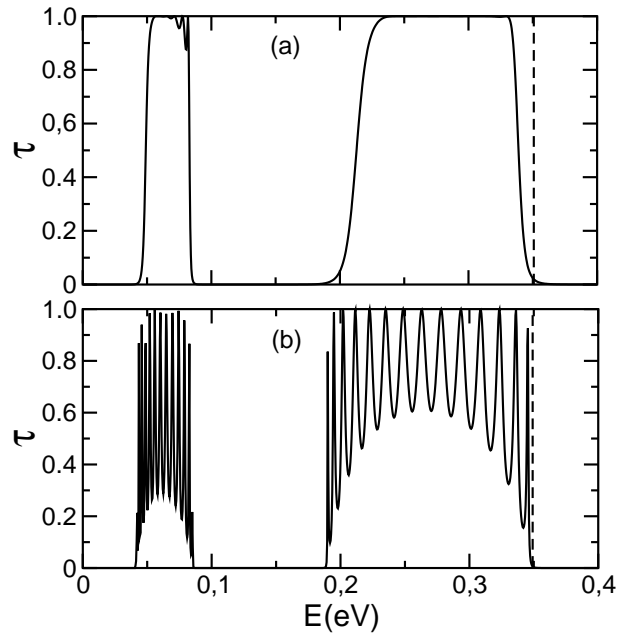


Figura 3.4. Coeficiente de transmisión para una SRG (a), y una SR uniforme (b). Se observa la aparición en los dos casos de dos minibandas por debajo de la barrera más alta, indicada por la línea discontinua vertical.

tancia, presenta un mejor comportamiento para dicho fin que las tradicionales SR sin modulación de composición. La idea de modular mediante una gaussiana algún parámetro estructural en heteroestructuras de distinta naturaleza ha resultado ser de utilidad. Así, en la referencia [59], se discute la validez de un filtro óptico en la región de los rayos X, para el que se propone una multicapa metálica con modulación gaussiana en los índices de refracción: en este trabajo se observa como la reflectividad óptica en la región de los rayos X mejora (banda plana de reflectividad sobre un mayor rango de longitudes de onda) en el caso de una multicapa con modulación gaussiana respecto al caso uniforme, pudiéndose seleccionar la región del espectro en la que el espejo es efectivo cambiando el

valor de la dispersión σ de la función moduladora (ver figura 3.5).

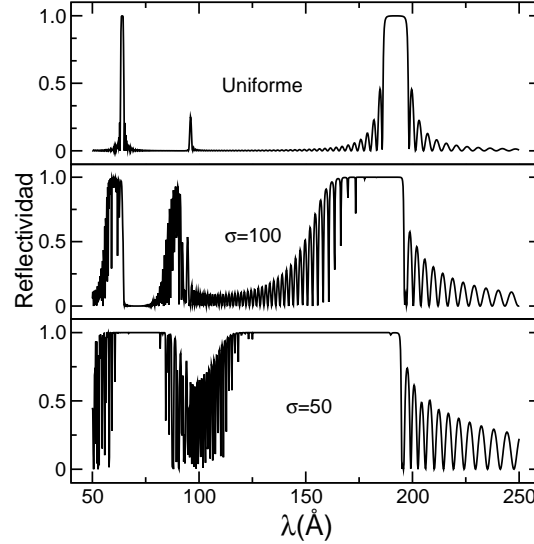


Figura 3.5. Reflectividad en la región de los rayos X de multicapas (102 periodos) no absorbentes con dos capas por periodo (A y B) de índices de refracción $n_A = 0,9200$ y $n_B = 0,9995$, respectivamente, y anchuras $d_A = d_B = 50\text{\AA}$. La figura muestra los resultados para el caso uniforme en el que $n_B = 0,9995$ es constante a lo largo de toda la estructura (panel superior), y el caso gaussiano en el que N varía a lo largo de la estructura con una envolvente gaussiana, de dispersión $\sigma = 100$ y $\sigma = 50$ (panel inferior).

3.2.2. Efectos del desorden

En la anterior sección hemos supuesto para el cálculo del coeficiente de transmisión que las SRs estudiadas estaban libres de defectos e imperfecciones. Sin embargo, durante el proceso de crecimiento de estas heteroestructuras es inevitable la aparición de una cierta cantidad de desorden que, como es bien sabido, tiene importantes efectos sobre sus propiedades de transporte [49, 50, 60]. En el caso concreto de las SRGs

una pequeña cantidad de desorden no intencional puede ser particularmente crítica en lo que se refiere a las peculiares propiedades de éstas como filtro pasa banda, más aún teniendo en cuenta lo estrecho de las barreras que se han considerado. Es por ello que se hace necesario hacer una estimación de hasta qué punto las sorprendentes propiedades de las SRGs son robustas frente a la existencia de desorden en las muestras, y de qué precisión es necesaria sobre los parámetros estructurales para que éstas no se pierdan.

Si seguimos el criterio de Mäder *y col.* [61], el desorden en las SRs puede clasificarse en dos grandes categorías: desorden lateral y desorden vertical. El desorden vertical aparece siempre que el grosor de las láminas o la fracción molar de las especies que forman alguna de las capas (la fracción molar de Al, x , en el caso de las SRGs) fluctúan en torno a sus valores nominales. El desorden vertical destruye la periodicidad de una SR uniforme a lo largo de la dirección de crecimiento. En lo que se refiere al desorden lateral, encontramos esta clase de desorden siempre que uno de los semiconductores (digamos A) penetra dentro del otro (digamos B), y viceversa, apareciendo islas y escalones en la intercara entre los dos materiales. Así, aparecen intercaras rugosas en las que se rompe la simetría translacional en el plano normal a la dirección de crecimiento. Ambos tipos de desorden aparecen durante el proceso de crecimiento de la heteroestructura.

Comenzaremos estudiando el desorden vertical. Para ello vamos a considerar la variación en el grosor de las láminas de los distintos materiales permitiendo que sus anchuras w_b^n y w_p^n (las anchuras de la n -ésima barrera y del n -ésimo pozo respectivamente), fluctúen en torno a sus valores nominales, w_b y w_p , de acuerdo con la ley

$$w_b^n = w_b(1 + W\epsilon_n), \quad (3.3)$$

con la condición adicional de que $w_b^n + w_p^n = w_b + w_p$. Aquí W es un

parámetro positivo que mide la fluctuación máxima de la anchura, mientras que los parámetros ϵ_n son números aleatorios no correlacionados con valor absoluto menor o igual que $1/2$. De forma más precisa, si $P(\epsilon_n)$ es la función de distribución de probabilidad de la variable aleatoria ϵ_n , tenemos

$$P(\epsilon_n) \begin{cases} 1, & \text{si } |\epsilon_n| < \frac{1}{2} \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (3.4)$$

De la misma manera describiremos las fluctuaciones en la fracción molar de Al: $x^n = x_0^n(1 + Y\epsilon_n)$, y por tanto, $U_b^n = U_0^n(1 + Y\epsilon_n)$, donde x^n es el valor de la fracción molar de Al en la barrera n -ésima, x_0^n es su valor nominal, U_b^n es la altura en energía de la barrera n -ésima, U_0^n el valor nominal de esta, e Y es un parámetro positivo que controla el valor máximo de las fluctuaciones.

Unos valores dados de W e Y y de las secuencias de números aleatorios $\{\epsilon_n\}$ identifican de forma única un perfil de potencial y por tanto una SRG. Nos proponemos a continuación dar una descripción estadística de las propiedades de transmisión de las SRGs con desorden no intencional. Para ello procederemos como sigue:

1. Construiremos M perfiles de potencial a partir de M secuencias aleatorias $\{\epsilon_n\}$ y calcularemos las correspondientes curvas de transmisión $\tau_i(E)$, $i = 1, \dots, M$ como lo hicimos en la sección anterior
2. Calcularemos, para cada valor de la energía E , el valor medio $\bar{\tau}(E)$, así como la desviación $s(E)$ del coeficiente de transmisión.

Hemos realizado distintos cálculos con varios valores del grado de desorden (amplitud máxima de la fluctuación) W . Para cada valor de W se han considerado $M = 100$ realizaciones del desorden. Podemos observar en la figura 3.6 el coeficiente de transmisión promedio $\bar{\tau}(E)$ y la desviación estándar $s(E)$ en los casos $W = 0,2, 0,4$, y $0,6$. Es importante señalar que $M = 100$ es un número suficientemente grande de realizaciones para dar una descripción estadísticamente fiable. De hecho es posible calcular que

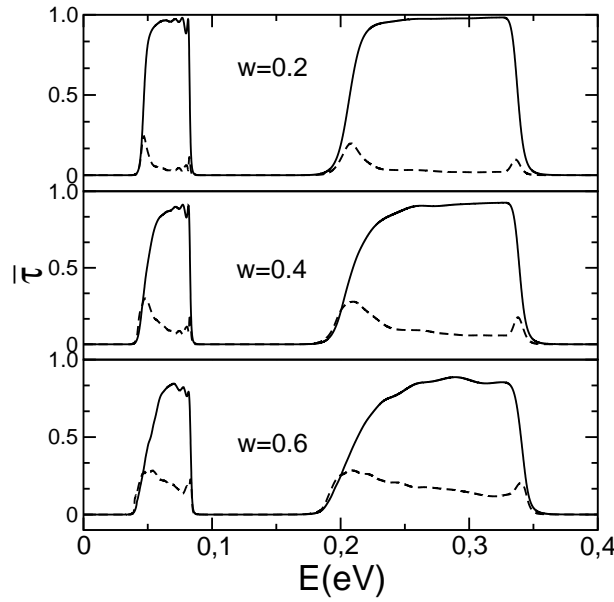


Figura 3.6. Efecto del desorden vertical sobre el coeficiente de transmisión en una SRG para distintos valores del parámetro de desorden W . La línea continua muestra el coeficiente de transmisión promediado sobre 100 realizaciones del desorden, mientras que la línea discontinua muestra la desviación estándar en función de la energía.

existe una probabilidad igual a 0.997 de que el valor medio del coeficiente de transmisión $\langle \tau \rangle$ se encuentre en el intervalo $[\bar{\tau} - 3s/\sqrt{M}, \bar{\tau} + 3s/\sqrt{M}]$. Con $M = 100$, este intervalo es de un tamaño insignificante comparado con la desviación estándar. La figura 3.6 muestra claramente que las sorprendentes propiedades de las SRGs como filtros pasa banda permanecen inalteradas hasta valores del grado de desorden tan grandes como $W = 0.4$. Para valores mayores estas propiedades se degradan cada vez más. Para $W = 0.4$, en el caso que consideramos, la fluctuación máxima en la anchura de las barreras es de 6\AA . Esta anchura es del orden de la anchura de dos monocapas atómicas depositadas durante el proceso de crecimiento. La curva de desviación estándar nos muestra que la variación

del coeficiente de transmisión de una muestra a otra (de una realización del desorden a otra) presenta sus valores máximos en los extremos de la banda. En el centro de la banda el coeficiente de transmisión se ve menos afectado por el desorden.

Lo que no nos muestra la curva de desviación estándar es si, para una realización dada del desorden, la transmisión en los bordes de la banda es suave, o por el contrario oscila. En la figura 3.7 mostramos las curvas

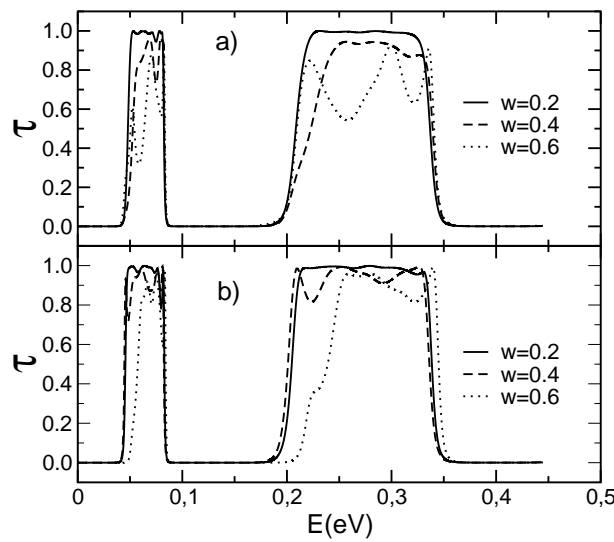


Figura 3.7. Coeficiente de transmisión para dos realizaciones particulares del desorden vertical (a) y (b). En cada una de las dos figuras mantenemos la misma secuencia $\{\epsilon_n\}$, mientras que se varía el parámetro de desorden W .

de transmisión para distintos grados de desorden y dos realizaciones (a) y (b) de éste. Estas curvas muestran claramente el efecto destructivo del desorden. También es posible observar cómo el efecto del desorden no implica necesariamente oscilaciones en la transmisión en los bordes de la banda. De nuevo observamos cómo para valores grandes del grado de desorden W , para una realización particular del desorden, las propiedades

de filtrado se degradan rápidamente. A pesar de ello, como se observa en la figura 3.8, estas propiedades continúan siendo mejores en el caso de una

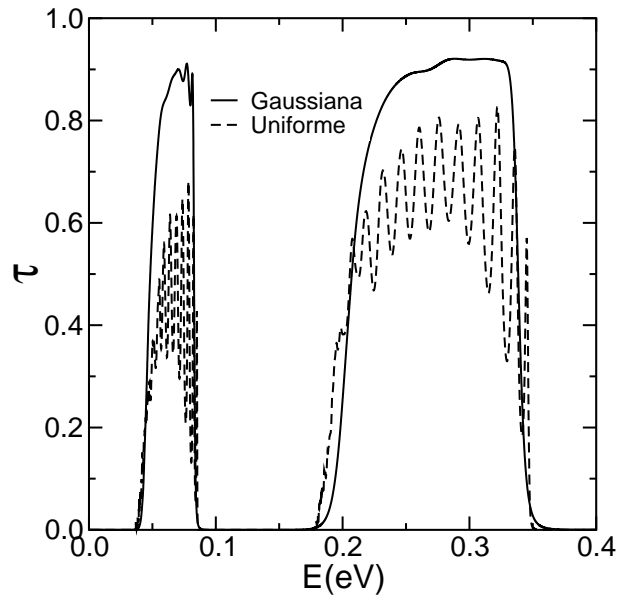


Figura 3.8. Coeficiente de transmisión para una SRG y una SR uniforme desordenadas, siendo el grado de desorden $W = 0,4$ en ambos casos.

SRG respecto al caso de una SR uniforme. En esta figura representamos el coeficiente de transmisión promediado sobre $M = 100$ realizaciones de una SRG frente al promediado en el caso de una SR uniforme.

Hasta ahora sólo nos hemos preocupado del desorden vertical, pero el desorden puede ser lateral también. En general es bastante difícil obtener resultados en el caso del desorden lateral (véase el capítulo 5), dado que este problema es estrictamente tridimensional. Sin embargo podemos simplificar el problema en el caso en que D , el tamaño promedio de las islas, no es particularmente pequeño. Para ello dividiremos la SR en Q canales de tamaño transversal d . Si escogemos d de manera que $d < D$ cada canal resulta ser, para un electrón incidente, uniforme en la dirección

transversal. Mostramos esta situación en la figura 3.9. Podremos ignorar

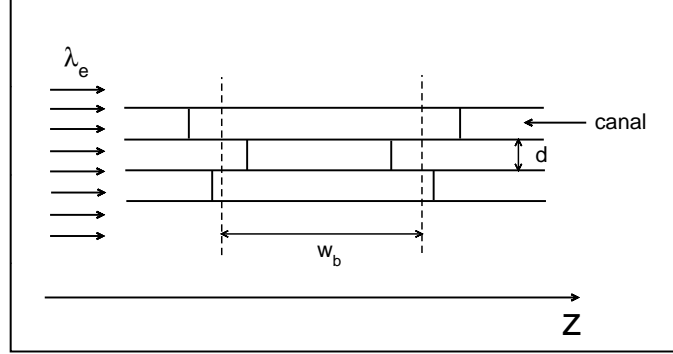


Figura 3.9. División de la SR en Q canales de tamaño d en la dirección transversal. Si escogemos d de manera que $d < D$, donde D es el tamaño promedio de las irregularidades de la superficie, cada canal será, en apariencia, uniforme en la dirección transversal para un electrón incidente. En la figura λ_e es la longitud de onda del electrón incidente, w_b es la anchura nominal de la barrera y z es la dirección de crecimiento de la SR.

la difracción de los electrones fuera de un canal siempre que

$$\frac{\lambda_e}{d} L < d, \quad (3.5)$$

donde L es la longitud total de la SR, y λ_e la longitud de onda de De Broglie del electrón. Con esta aproximación suprimimos la posibilidad de fenómenos de interferencia entre distintos canales. Con $L \sim 100$ nm y una energía de los electrones incidentes $E_z \sim 0,04$ eV, la ecuación (3.5) se satisface para $d \sim 50$ nm. Además estamos suponiendo que el recorrido libre medio electrónico en la dirección transversal es menor que el tamaño de las islas $l_e \lesssim D$. Dentro de cada canal el problema del transporte puede ahora resolverse en términos de desorden vertical: cada canal tendrá unos valores determinados para la anchura de pozos y barreras y el coeficiente de transmisión para cada canal τ_C podremos

calcularlo como hemos venido haciendo hasta ahora. Teniendo en cuenta que hemos dividido la SR en Q canales, el coeficiente de transmisión de una realización determinada del desorden lateral es entonces

$$\tau_L = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q \tau_{C,i}, \quad (3.6)$$

donde $\tau_{C,i}$ es el coeficiente de transmisión del canal i -ésimo. De nuevo vamos a caracterizar la distribución de valores para el coeficiente de transmisión a una energía dada mediante su valor medio $\bar{\tau}_L(E)$ y su desviación estándar $s_L(E)$. Estas cantidades pueden ser expresadas, a partir de su definición y de la ecuación (3.6), en términos de $\bar{\tau}_C(E)$ y $s_C(E)$, es decir del valor medio y de la desviación estándar del coeficiente de transmisión de un canal. Así obtenemos $\bar{\tau}_L(E) = \bar{\tau}_C(E)$ y $s_L(E) = s_C(E)/\sqrt{Q'}$, donde Q' es el número de canales no correlacionados. Dado que el tamaño transversal de la región en la que el grosor de la barrera es del orden de D , se tiene que $Q' \approx (\text{area total})/D^2$.

El desorden vertical tiene un impacto más profundo sobre la curva de transmisión que el desorden lateral. De hecho, incluso aunque la curva de transmisión promedio es prácticamente la misma en ambos casos —como es natural—, la desviación estándar tiene valores mayores en el caso del desorden vertical. Podemos ejemplificar esto considerando que típicamente las dimensiones laterales de una SR son del orden de $100 \mu\text{m}$ [58]. Tomando $D \sim 50\text{nm}$ obtenemos una desviación estándar para el desorden lateral 10^4 veces más pequeña que en el caso vertical.

Las fluctuaciones en la fracción molar de Al en las barreras son, como ya hemos dicho, otra fuente de desorden vertical. Sin embargo es posible mostrar cómo estos apenas influyen en la calidad de la SRG y en su capacidad como filtro pasa banda. En la figura 3.10 mostramos el coeficiente de transmisión calculado para una fluctuación en la fracción molar de Al de un 10 %, bastante mayor de las encontradas en procesos

de crecimiento por MBE. Como se puede ver, este desorden no modifica de forma significativa el coeficiente de transmisión.

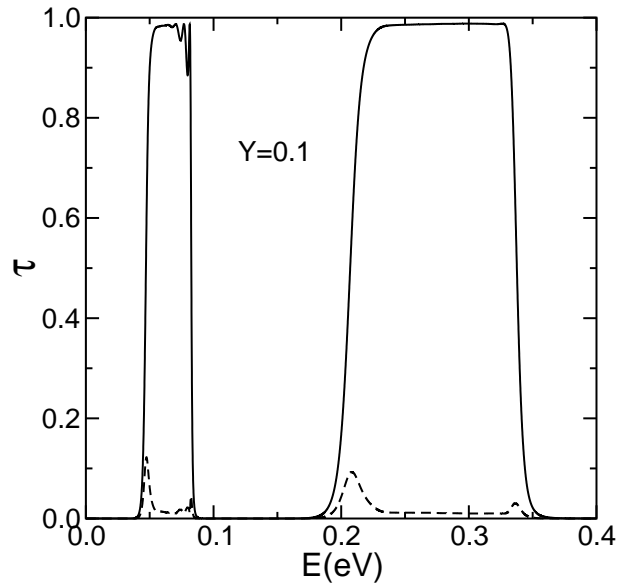


Figura 3.10. Efecto de la fluctuación de la fracción molar de Al sobre la curva de transmisión de una SRG. La línea continua nos muestra el coeficiente de transmisión promediado sobre 100 realizaciones del desorden, mientras que la línea a trazos nos muestra la desviación estándar del coeficiente de transmisión en función de la energía. El grado de desorden considerado es $Y = 0,1$.

3.2.3. Característica $j - V$

Hasta ahora hemos estudiado únicamente el coeficiente de transmisión de las SRGs. Esta cantidad es de utilidad dado que, esencialmente, es equivalente a la conductancia a temperatura cero. Ahora estamos, sin embargo, interesados en encontrar una magnitud física susceptible de ser observada experimentalmente de forma directa. Por ello, a continuación vamos a calcular las curvas de corriente-voltaje en medidas de dos

contactos tanto para una SRG como para una SR uniforme a distintas temperaturas.

La densidad de corriente unidimensional a temperatura T para una SR sometida a un campo eléctrico uniforme puede calcularse en el marco de un modelo de estado estacionario [62, 63] mediante la siguiente expresión

$$j(V) = \frac{m_e^* e k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty N(E, V) \tau(E, V) dE, \quad (3.7)$$

donde V es el potencial aplicado, y k_B es la constante de Boltzman. $N(E, V)$ es una función estadística que tiene en cuenta la ocupación de los estados en los contactos de la SR, de acuerdo con una distribución de Fermi, y que está dada por

$$N(E, V) = \ln \left(\frac{1 + \exp[(E_F - E)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E - eV)/k_B T]} \right), \quad (3.8)$$

siendo E_F el nivel de Fermi en el contacto que se encuentra a mayor potencial, que supondremos para este cálculo que coincide con el borde de la banda de conducción del GaAs. El coeficiente de transmisión para un valor del voltaje dado V , $\tau(E, V)$ lo obtendremos discretizando la ecuación (3.1) en la que sustituiremos el potencial $U(z)$ por $U'(z) = U(z) - eVz/L$ en el que el término lineal da cuenta de un campo eléctrico uniforme aplicado [64]. Supondremos que el campo eléctrico es aplicado únicamente en el interior de la SR, mientras que se hace cero en los contactos. Para la discretización consideraremos el intervalo $[0, L]$ como una malla de puntos $z_k \equiv ks$, en donde s será la constante de red de la malla. De esta forma, la versión discretizada de la ecuación (3.1) puede reescribirse en forma matricial de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} \psi(z_{k+1}) \\ \psi(z_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_k & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(z_k) \\ \psi(z_{k-1}) \end{pmatrix} \equiv P_k \begin{pmatrix} \psi(z_k) \\ \psi(z_{k-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

donde $\alpha_k \equiv 2 + (2m_e^* s^2 / \hbar^2) [U(z_k) - eV z_k / L - E]$. Expresada de esta forma

matricial, la ecuación (3.1), es susceptible de ser resuelta mediante un método de matriz de transferencia. De hecho, iterando (3.9) obtenemos

$$\begin{pmatrix} \psi(z_{N_s+1}) \\ \psi(z_{N_s}) \end{pmatrix} = P_{N_s} \dots P_0 \begin{pmatrix} \psi(z_0) \\ \psi(z_{-1}) \end{pmatrix} \equiv T(N_s) \begin{pmatrix} \psi(z_0) \\ \psi(z_{-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

donde $T(N_s)$ es la matriz de transferencia global y N_s es el número total de puntos en la discretización de la SR. La cantidad $T(N_s)$ es real y relaciona los valores de la función envolvente en presencia de un voltaje aplicado a ambos extremos de la SR. La solución de la ecuación (3.1) en la región libre de campo puede escribirse como

$$\psi(z_k) = \begin{cases} e^{iq_i k} + r e^{-iq_i l} & k \leq 0, \\ t e^{iq_d k} & k \geq N_s, \end{cases} \quad (3.11)$$

donde, para valores pequeños de s , $q_i \equiv \sqrt{2m_e^* E s^2 / \hbar^2}$ y $q_d \equiv \sqrt{2m_e^* (E + eV) s^2 / \hbar^2}$. Usando las ecuaciones (3.10) y (3.11), encontramos que el coeficiente de transmisión viene dado por

$$\tau(E, V) = \frac{2 \sin(q_i) \sin(q_d)}{D(E, V)}, \quad (3.12)$$

con

$$\begin{aligned} D(E, V) \equiv & T_{11}^2 + T_{12}^2 + T_{21}^2 + T_{22}^2 \\ & + 2(T_{11}T_{12} + T_{21}T_{22}) \cos q_i \\ & - 2(T_{11}T_{21} + T_{12}T_{22}) \cos q_d \\ & - 2(T_{11}T_{22} + T_{12}T_{21}) \cos q_i \cos q_d \\ & + 2 \sin q_i \sin q_d, \end{aligned}$$

donde, por brevedad, se ha omitido la dependencia de T_{ij} en N_s . Teniendo en cuenta que $T(k) = P_k T(k-1)$ y que $T(0) = P_0$ es posible encontrar

las siguientes relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} T_{11}(k) &= \alpha_k T_{11}(k-1) - T_{11}(k-2), \\ T_{12}(k) &= \alpha_k T_{12}(k-1) - T_{12}(k-2), \\ T_{21}(k) &= T_{11}(k-1), \\ T_{22}(k) &= T_{12}(k-1), \quad k = 1, 2, \dots, N_s. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Estas ecuaciones recursivas junto con las condiciones iniciales $T_{ij}(-1) = \delta_{ij}$, $T_{11}(0) = \alpha_0$, $T_{12}(0) = -1$, $T_{21}(0) = 1$, y $T_{22}(0) = 0$, nos van a permitir calcular el coeficiente de transmisión usando (3.12). Una vez calculado numéricamente el coeficiente de transmisión, podemos determinar la curva de corriente-voltaje a partir de la ecuación (3.7). En la figura 3.11 mostramos la curva $j - V$ tanto para una SRG como para una SR uniforme a dos temperaturas distintas (77 y 300K). Lo prime-

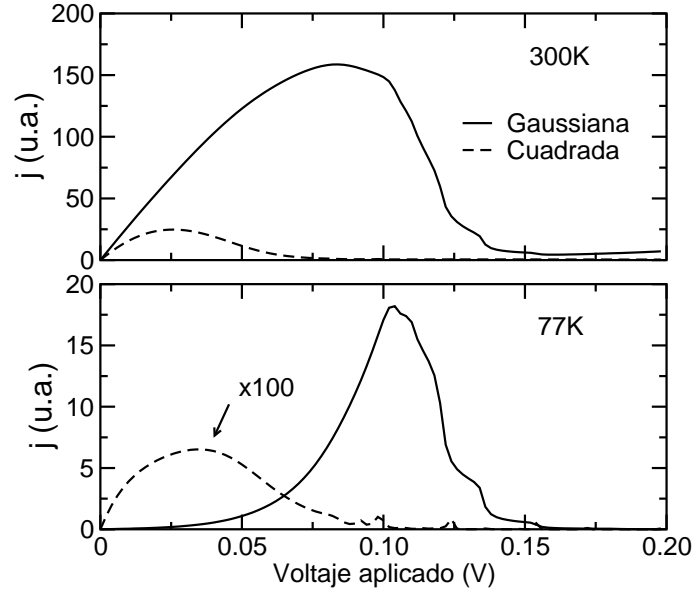


Figura 3.11. Curvas de corriente frente a voltaje para una SRG (línea continua) y para una SR uniforme (línea a trazos), calculadas a dos valores distintos de la temperatura, $T = 300\text{K}$ y $T = 77\text{K}$.

ro que se observa es que las densidades de corriente encontradas en la SRG llegan a ser órdenes de magnitud mayor que las encontradas para la SR uniforme. También se puede observar en las figuras la aparición en las curvas de regiones de resistencia diferencial negativa para ambas SRs, aunque las tasas pico-valle son muy distintas en los dos casos. En particular las tasas pico-valle en el caso gaussiano son 40 y 20 a 77 y 300K respectivamente. Estos resultados corroboran aún más la idea de que las SRGs constituyen un buen candidato como dispositivo de filtro en energías.

3.2.4. Interacción electrón-electrón: experimentos de PL

Durante el desarrollo de esta tesis, y en colaboración con los grupos del Dr. Rudolf Hey del Paul Drude Institut für Festkörperelektronik (Berlín) y del Dr. Vittorio Bellani del Dipartimento di Fisica ‘A. Volta’ (Università di Pavia), se crecieron y caracterizaron mediante medidas ópticas de PL a baja temperatura, muestras de SRG y SR uniforme. Las muestras fueron crecidas por MBE, y las tablas 3.1 y 3.2 muestran los parámetros estructurales y de composición que fueron considerados en cada una de las dos SRs.

Semiconductor	Dopado	Tamaño
GaAs:Si	$6 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	3,0 nm
$\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As:Si}$	$4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	100.0 nm
$\text{Al}_{0,014}\text{Ga}_{0,986}\text{As}$		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
$\text{Al}_{0,036}\text{Ga}_{0,964}\text{As}$		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
$\text{Al}_{0,079}\text{Ga}_{0,921}\text{As}$		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
$\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$		1.5 nm

Semiconductor	Dopado	Tamaño
GasAs		6.2 nm
Al _{0,247} Ga _{0,753} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,352} Ga _{0,648} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,436} Ga _{0,564} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,468} Ga _{0,532} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,436} Ga _{0,564} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,352} Ga _{0,648} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,247} Ga _{0,753} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,15} Ga _{0,85} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,079} Ga _{0,921} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,036} Ga _{0,964} As		1.5 nm
GasAs		6.2 nm
Al _{0,014} Ga _{0,986} As		1.5 nm
Al _{0,3} Ga _{0,7} As:Si	$4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	100.0 nm
GaAs:Si	$4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	50,0 nm
n ⁺ - GaAs		

Cuadro 3.1. Parámetros estructurales de la SRG usada en los experimentos de PL. Nótese la ausencia de uniformidad en la fracción de Al.

Semiconductor	Dopado	Tamaño
GaAs:Si	$6 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	3,0 nm
$\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As:Si}$	$4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	100.0 nm
$\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$		1.5 nm

GaAs		6.2 nm
$\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$		1.5 nm

$\vdots \quad \times 14$

$\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As:Si}$	$4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	100.0 nm
GaAs:Si	$4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$	50,0 nm
$\text{n}^+ - \text{GaAs}$		

Cuadro 3.2. Parámetros estructurales de la SR uniforme usada en los experimentos de PL.

En la figura 3.12 podemos observar los espectros de emisión de PL obtenidos a una temperatura de 4K tanto para la SRG como para la SR uniforme. Los espectros de emisión fueron realizados con un láser de Argon ($\lambda = 514,5 \text{ nm}$), siendo la densidad de potencia luminosa sobre la muestra de unos $2,5 \text{ W/cm}^2$. La luz emitida por las muestras fue detectada usando un detector de PbS enfriado, mediante una técnica convencional de *lock-in*, y analizada con un monocromador Jobin Yvon-Spex HR 460 de 0,5 m. En los resultados cabe destacar un claro desplazamiento a menores energías del máximo de PL en el caso gaussiano frente al uniforme. Este desplazamiento es provocado, evidentemente, por la distinta estructura electrónica de las dos SRs. Debido a las concentraciones de dopado en los reservorios de las muestras de los experimentos, se hace necesario un estudio de la estructura electrónica de las SRs que tenga en cuenta el efecto de la interacción electrón-electrón en ellas. En esta sección nos proponemos realizar un cálculo teórico de tipo autoconsistente

de la estructura electrónica de las SRs que incorpore este tipo de interacción, comprobando si nuestros resultados se ajustan a los observados en la figura 3.12.

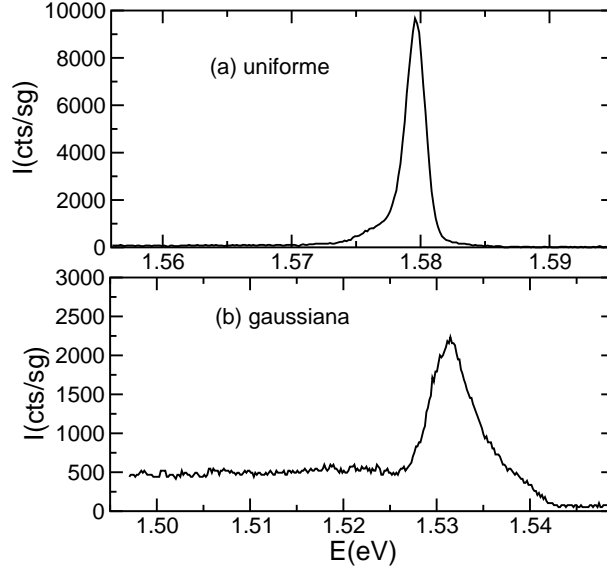


Figura 3.12. Espectros de PL obtenidos para una SRG y una SR uniforme a $T = 4\text{K}$. Nótese las distintas escalas de energías.

A continuación vamos a desarrollar un método autoconsistente de diagonalización del hamiltoniano electrónico de la SR, que nos permitirá calcular los autoestados electrónicos de ésta y, a partir de ellos, de forma aproximada, la energía de las transiciones interbanda que nos dan la posición en el espectro del pico de PL. La ecuación de partida para el cálculo autoconsistente será la ecuación para la función envolvente

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right] \psi(z) = E\psi(z), \quad (3.14)$$

en la que m^* será la masa efectiva, bien electrónica m_e^* en la banda de conducción, bien de huecos pesados m_{hp}^* en la banda de valencia. Nótese

que en el presente cálculo vamos a utilizar por simplicidad una masa efectiva homogénea a lo largo de la SR. En nuestra ecuación de partida sustituiremos el término de potencial $U(z)$ por un nuevo término $U'(z)$ que constará de distintas contribuciones

$$U(z) \leftrightarrow U'(z) \equiv U(z) + U_{CC}(z) + U_H(z), \quad (3.15)$$

donde U_{CC} , es el término local de canje-correlación, y U_H es el término de Hartree. El potencial de canje-correlación obtenido mediante la parametrización de Hedin-Lundquist [65] es

$$U_{CC}(z) = -\frac{\text{Ry}^*}{10,5\pi\alpha r(z)} \left[1 + 0,7734r(z) \ln \left(1 + \frac{1}{r(z)} \right) \right], \quad (3.16)$$

donde $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ y

$$r(z) = \frac{1}{21} \left(\frac{4}{3} \pi a^{*3} n(z) \right)^{-1/3}.$$

Aquí $n(z)$ es la densidad electrónica local, y $\text{Ry}^* = e^2/8\pi\epsilon_0\kappa a^*$ y $a^* = 4\pi\epsilon_0\kappa\hbar^2/m^*$ son la constante de Ryberg y radio de Bohr efectivos respectivamente. La constante dieléctrica local κ , al igual que la masa efectiva, supondremos que no depende de la coordenada espacial z . El potencial de Hartree $U_H(z)$ lo obtendremos por integración de la ecuación de Poisson unidimensional en la que las fuentes de potencial son, por un lado la densidad de donadores ionizados en los reservorios, $N_D^+(z)$, que no coincide necesariamente con la densidad de dopado, y por otro lado la densidad electrónica en la SR, $n(z)$,

$$\frac{d^2 U_H(z)}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon_0\kappa} [N_D^+ - n(z)]. \quad (3.17)$$

La condición de contorno a aplicar a esta ecuación será la anulación de U_H fuera de la SR y los reservorios. La densidad electrónica puede escribirse

como

$$n(z) = \sum_j n_j |\psi_j(z)|^2, \quad (3.18)$$

donde el índice j etiqueta los distintos autoestados de la ecuación (3.14), y n_j es la función de ocupación del nivel j -ésimo que está dada por la siguiente expresión

$$n_j = \frac{k_B T m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_j}{k_B T} \right) \right], \quad (3.19)$$

siendo E_j la energía del nivel j -ésimo.

Esta forma de plantear el problema impone la necesidad de una solución autoconsistente, dado que la densidad electrónica depende del valor local de las funciones envolventes, mientras que estas a su vez se calculan a partir del potencial de Hartree para cuyo cálculo es necesaria la densidad electrónica. El proceso de autoconsistencia puede caracterizarse mediante un esquema iterativo. Si usamos el superíndice i para denotar todas las cantidades calculadas en el paso i -ésimo del procedimiento iterativo, entonces un paso del método autoconsistente puede describirse como sigue:

1. Calculamos el potencial $U^i(z) = U(z) + U_C^i(z) + U_H^i(z)$.
2. Diagonalizamos el Hamiltoniano en la ecuación (3.14) obteniendo así $\psi_j^i(z)$ y E_j^i .
3. Calculamos el nivel de Fermi en los contactos a partir de la expresión

$$a^{*2} N_D^+ = \sum_{j=1}^N n_j^i.$$

4. Calculamos $n^i(z)$ a partir de la ecuación (3.18).
5. Calculamos $U_H^{i+1}(z)$, así como $U_{CC}^{i+1}(z)$, a partir de la $n^i(z)$ calculada con anterioridad.

6. Comprobamos si se satisface la condición de autoconsistencia. En nuestro caso esta condición consiste en que la contribución de Hartree al hamiltoniano sea igual, dentro de una cierta tolerancia, en dos pasos consecutivos, esto es

$$\frac{|U_H^{i+1}(z) - U_H^i(z)|}{|U_H^{i+1}(z)|} \times 100 < \varepsilon,$$

donde ε es la tolerancia expresada en tanto por ciento.

7. Si la condición de autoconsistencia no se alcanza, entonces redefinimos el potencial de Hartree $U_H^{i+1}(z) \leftrightarrow \lambda U_H^{i+1}(z) + (1 - \lambda)U_H^i(z)$, hacemos $i \leftrightarrow i + 1$ y volvemos al punto 1.
8. En el caso de que se alcance la condición de autoconsistencia haremos $\psi_j(z) \equiv \psi_j^i(z)$ y $E_j \equiv E_j^i$ y finalizamos el cálculo autoconsistente.

El parámetro λ que aparece en el punto 7 se introduce para controlar la convergencia del método autoconsistente. Se sabe, por ejemplo, que en el caso $\lambda = 1$, este método autoconsistente no converge para densidades de dopado ionizado tales que $N_D^+ \gtrsim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Una buena elección para densidades de donores ionizados no muy elevadas, como es el caso que nos ocupa, es $\lambda = 0,5$.

En la figura 3.13 mostramos los resultados obtenidos para los autoestados y autonergías de electrones y huecos pesados en el borde de las bandas de conducción y valencia, respectivamente, en el caso de la SRG. La diferencia de energía entre estos estados es de 1,53 eV, en buen acuerdo con lo observado en el experimento de PL (figura 3.12). Esta misma diferencia de energía calculada en el caso de la SR uniforme es de 1,58 eV (véase la figura 3.14), de nuevo en muy buen acuerdo con el experimento.

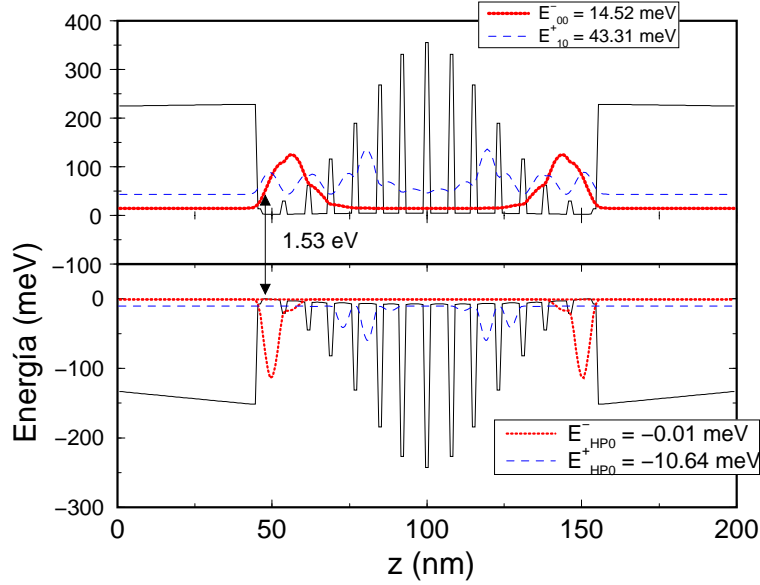


Figura 3.13. Niveles de energía de electrones y huecos pesados para una SRG a $T = 4K$. Se muestran las funciones envolventes correspondientes al estado fundamental y el primer estado excitado. También se ha representado los perfiles de las bandas de conducción y de valencia obtenidos autoconsistentemente.

3.2.5. Modelo discreto

En esta sección estamos interesados en investigar un modelo de SRG en la que las barreras de potencial son del tipo delta de Dirac. El interés por este modelo es doble. Por un lado hay un interés práctico, dado que un modelo como este simula una SRG con modulación de dopado de tipo delta. Por otro lado la herramienta matemática que vamos a desarrollar para estudiar el sistema resulta de utilidad, como veremos, para el estudio de la transición localizado-deslocalizado en sistemas aperiódicos, en particular en sistemas descritos mediante la ecuación de Harper.

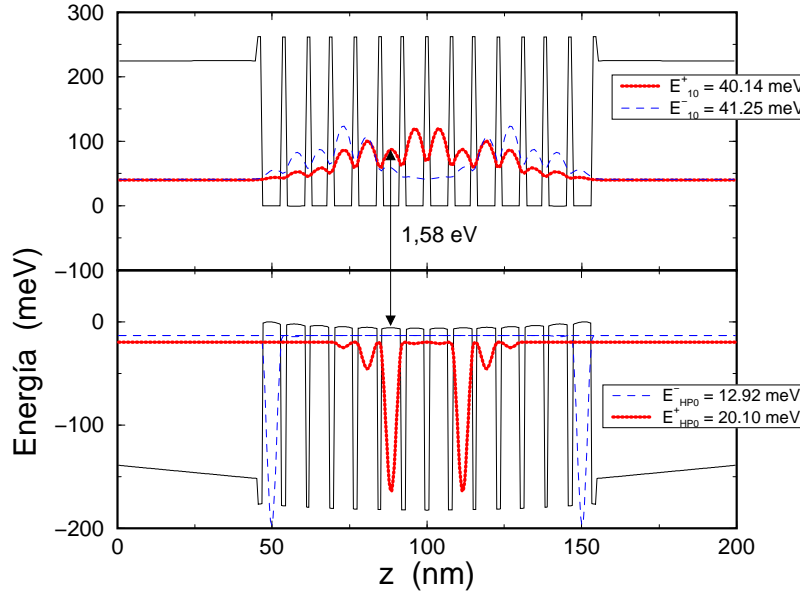


Figura 3.14. Niveles de energía de electrones y huecos pesados para una SR uniforme a $T = 4\text{K}$. Se muestran las funciones envolventes correspondientes al estado fundamental y el primer estado excitado. También se han representado los perfiles de las bandas de conducción y de valencia obtenidos autoconsistentemente.

Nuestro punto de partida será la ecuación para la función envolvente electrónica en una SR

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) + \sum_n \epsilon_n \delta(z - na) \psi(z) = E \psi(z), \quad (3.20)$$

donde a equivale al periodo de la SR, y ϵ_n al área de las barreras. Para los ϵ_n vamos a considerar la siguiente expresión

$$\epsilon_n = 2\lambda \cos[2\pi\mu(n - n_0)] \exp\left[-\frac{(n - n_0)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (3.21)$$

Esta expresión se reduce en el caso $\mu = 0$ a la de la altura de las barreras en una SRG con barreras de tipo delta, mientras que para $\mu = (\sqrt{5}-1)/2$, la inversa de la sección áurea, y en el límite $\sigma \rightarrow \infty$, la ecuación (3.20) con ϵ_n así definido se transforma en la ecuación de Harper.

La ecuación (3.20) puede ser convertida, mediante una transformación de Poincaré [37, 66], en una ecuación de tipo *enlace fuerte* de la forma

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - E_n \psi_n = 0, \quad (3.22)$$

donde

$$E_n = \epsilon_n \frac{\text{sen}(k)}{k} - \cos(k), \quad (3.23)$$

siendo k el vector de onda dado por la ecuación $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$.

Estamos interesados ahora en resolver la ecuación (3.22) en el caso gaussiano, es decir, con un valor finito de σ . Podemos considerar el potencial gaussiano como un defecto local no puntual conectado a dos redes semi infinitas en las que hay transmisión perfecta. Para calcular la transmitividad de este sistema vamos a tratar de eliminar el defecto local gaussiano, aprovechando la simetría de éste, de manera que, una vez eliminado, el cálculo del coeficiente de transmisión del sistema se reduzca al de un sistema renormalizado consistente en una red uniforme con un único defecto de tipo dimérico. Para ello iremos diezmado los sitios de la red empezando por el situado por el centro de la campana gaussiana, etiquetado como n_0 , tal y como se muestra en la figura 3.15. Esto conduce a un sistema renormalizado consistente en un dímero en el que las energías de sitio se pueden escribir como $\bar{E}_1 = E_1 - \bar{\gamma}_1$ y la constante de acoplo entre los dos sitios del dímero —inicialmente esta constante de acoplo es 1 en todos los sitios de la red como puede verse en la ecuación (3.22)—, es $\bar{\gamma}_1 = 1/E_0$. Si continuamos iterativamente con este proceso de diezmado de sitios de la red, en el paso n -ésimo, tendremos una red renormalizada con un dímero en el que las energías de sitio se denotan por \bar{E}_{n+1} y la constante de acoplo entre estos sitios se denota por $\bar{\gamma}_{n+1}$.

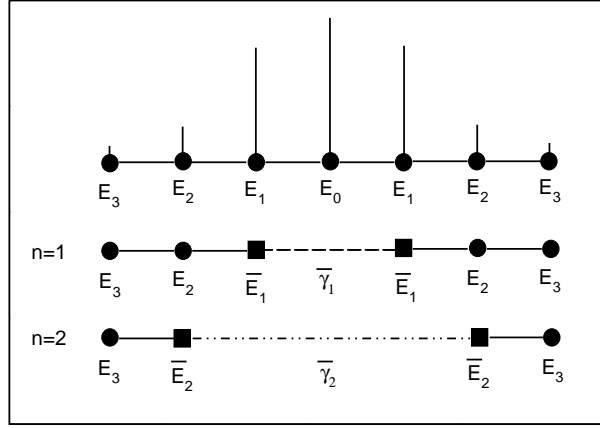


Figura 3.15. Modelo de enlace fuerte con modulación de tipo gaussiano mostrando el proceso iterativo de diezmado.

Este esquema de diezmado nos conduce a las siguientes ecuaciones que describen una transformación iterativa en el espacio bidimensional de \bar{E} y $\bar{\gamma}$

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_{n+1} &= \frac{\bar{\gamma}_n}{\bar{E}_n^2 - \bar{\gamma}_n^2} \\ \bar{E}_{n+1} &= E_{n+1} - \frac{\bar{E}_n}{\bar{E}_n^2 - \bar{\gamma}_n^2}.\end{aligned}\quad (3.24)$$

En lo que sigue denominaremos esta transformación como *transformación dimérica* (TD). Es importante señalar que los parámetros específicos del modelo —los valores de σ y μ — se encuentran contenidos en el término E_{n+1} , y que, por tanto, la TD contiene toda la complejidad del sistema estudiado, que se manifiesta en una constante de acoplo y energía de sitio que tienen una dependencia altamente no lineal en la energía. La aparente falta de simetría de las ecuaciones (3.24) puede hacerse desaparecer

mediante el siguiente cambio de variables

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_n &= \frac{1}{2} (\bar{E}_n + \bar{\gamma}_n) , \\ \bar{\Gamma}_n &= \frac{1}{2} (\bar{E}_n - \bar{\gamma}_n) .\end{aligned}\tag{3.25}$$

El resultado de hacer este cambio de variables es la siguiente nueva transformación discreta

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_{n+1} &= \frac{1}{2} \left(E_{n+1} - \frac{1}{\bar{\epsilon}_n} \right) , \\ \bar{\Gamma}_{n+1} &= \frac{1}{2} \left(E_{n+1} - \frac{1}{\bar{\Gamma}_n} \right) .\end{aligned}\tag{3.26}$$

Como podemos ver el cambio de variable, no sólo hace simétricas las ecuaciones, sino que además desacopla las antiguas variables convirtiendo el problema matemático originalmente bidimensional en dos problemas unidimensionales. Dado que no estamos interesados tanto en las propiedades matemáticas de la transformación como en el significado físico de las variables, continuaremos nuestro estudio con las variables originales \bar{E}_n y $\bar{\gamma}_n$.

La utilidad de la TD surge del hecho de que cambios en los parámetros del sistema (λ en el caso del sistema bajo estudio) se reflejan en cambios significativos en las trayectorias de la transformación en el espacio $\{\bar{E}, \bar{\gamma}\}$, tanto para valores finitos de σ como en el caso $\sigma \rightarrow \infty$. De hecho, a pesar de que la existencia de un *defecto* local de tipo gaussiano nos ha sido de ayuda para visualizar el proceso de diezmado, esta no es realmente necesaria. Las trayectorias en el espacio de fases (el espacio $\{\bar{E}, \bar{\gamma}\}$ en el caso de la TD) —el llamado diagrama de fases de la transformación— nos va a proporcionar información relevante acerca de propiedades del sistema. En particular, un cambio en las soluciones de equilibrio de la transformación discreta (3.24) cuando cambiamos los parámetros de la transformación, μ y σ en nuestro caso, van a mostrar un cambio en el

comportamiento físico del sistema que estudiamos. Estas soluciones de equilibrio, llamadas también puntos fijos, pueden ser de distintos tipos. Concretamente, cuando las trayectorias en el espacio de fases convergen a una ó N soluciones hablaremos de atractores simples o de periodo N , respectivamente.

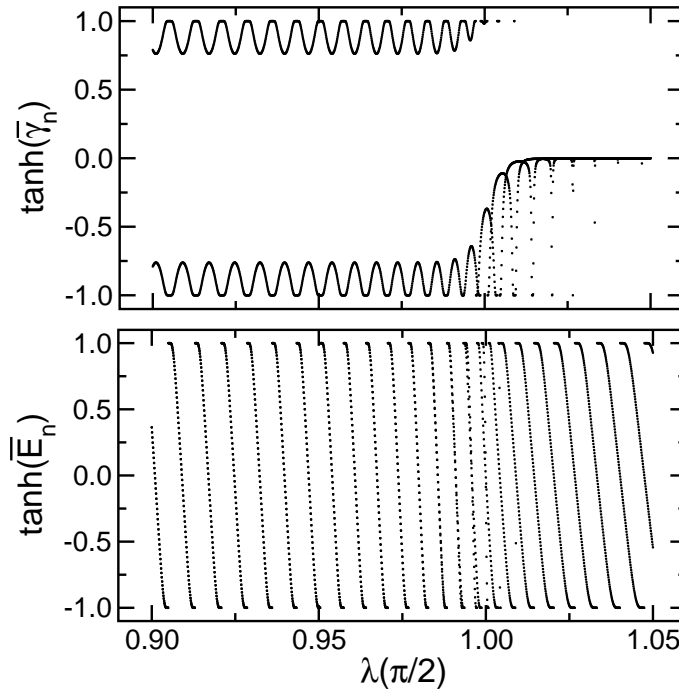


Figura 3.16. Variación en los valores asíntóticos de la constante de acoplo $\bar{\gamma}_n$ y energía de sitio \bar{E}_n renormalizadas en función del parámetro λ , calculadas para $\mu = 0$ y $\sigma = 100$. La función tangente hiperbólica es usada por una cuestión de escala cuando las cantidades $\bar{\gamma}_n$ y \bar{E}_n divergen.

A continuación vamos a estudiar el modelo puramente gaussiano, es decir, el caso en el que $\mu = 0$. La figura 3.16 muestra cómo la transición localizado deslocalizado se manifiesta a través de una variación del atractor de la transformación bajo estudio. En la fase subcrítica, en la

que el sistema tiene un coeficiente de transmisión igual a 1, el atractor presenta un ciclo límite biperiódico en el caso de la constante de acoplo renormalizada $\bar{\gamma}$, mientras que está caracterizado por un punto fijo en el caso de la energía de sitio renormalizada \bar{E} . Lejos del punto crítico el atractor muestra un patrón oscilatorio regular, que es periódico en λ con período $\approx 1/\sigma$. A medida que nos acercamos a la zona de transición el ciclo biperiódico comienza a perder su simetría, degenerando en un atractor con un ciclo también biperiódico pero asimétrico en el caso de $\bar{\gamma}$. Por otro lado, el punto crítico para el atractor de \bar{E} en la fase deslocalizada es sustituido por un ciclo biperiódico en la fase localizada. La fase localizada se caracteriza además por un decaimiento exponencial de la constante de acoplo con el tamaño del sistema, con una longitud característica ξ que está relacionada con la longitud de localización de la función envolvente ψ , $\bar{\gamma} \approx \exp[-(2n/\xi)]$. Este decaimiento resulta, en el límite termodinámico, en la anulación de la constante de acoplo, de manera que el dímero se *rompe* y el coeficiente de transmisión se anula en la fase localizada.

En la transición que hemos discutido, la fase metálica está descrita por soluciones en forma de onda plana que sufren un cambio de fase real en el defecto dimérico. En la fase aislante, por contra, este cambio de fase está dado por una cantidad imaginaria. Imponiendo esta condición sobre las soluciones del sistema renormalizado, es posible encontrar la condición de transmisión perfecta que viene dada por el conjunto de valores de la energía E para los que la siguiente función se anula

$$f_n(\lambda, \sigma, E) = 1 - \bar{\gamma}_n^2 + \bar{E}_n(\bar{E}_n - E_n). \quad (3.27)$$

La figura 3.17 muestra la variación en f_n y el coeficiente de transmisión en el caso puramente gaussiano, es decir, con $\mu = 0$, en función de la energía. Podemos ver que la condición de anulación de f_n coincide con la condición de transmisión perfecta, es decir, es cero para las energías

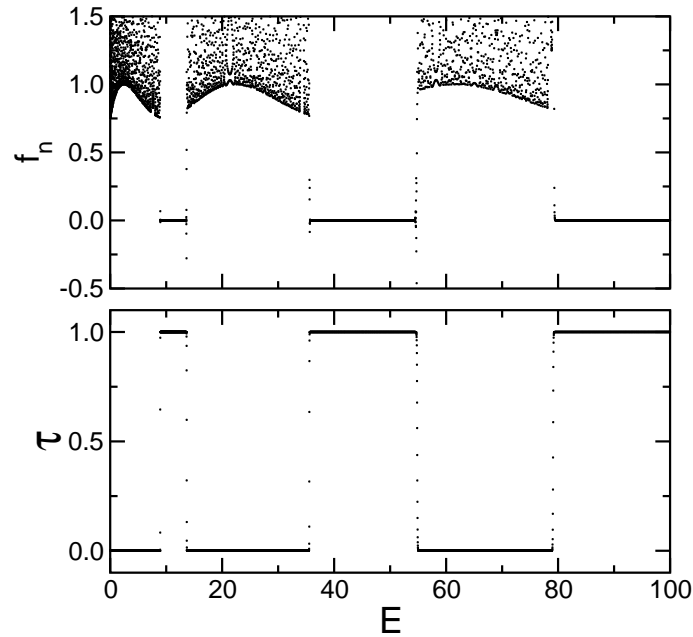


Figura 3.17. Coeficiente de transmisión (recuadro inferior) para una SRG con barreras de tipo δ . El recuadro superior muestra el comportamiento de la función f_n en función de la energía, comprobándose que esta función se anula cuando se satisface la condición de transmisión perfecta.

correspondientes a las minibandas de transmisión de la SRG con barreras de tipo delta. Por tanto, la anulación de la función f_n resulta de utilidad para determinar el umbral de localización en sistemas como los estudiados.

Como ya hemos mencionado, el esquema de renormalización que hemos descrito puede resultar útil para estudiar sistemas aperiódicos. En particular haciendo $\sigma \rightarrow \infty$ obtenemos y $K = \pi/2$ nos encontramos en el centro de la banda en la ecuación de Harper unidimensional. En este caso la fase subcrítica no es un atractor, como en el caso puramente gaussiano. A medida que λ crece, las trayectorias de la TD resultan ser cada vez

más complejas (ver la figura 3.18) colapsando finalmente sobre una línea vertical correspondiente a $\bar{\gamma}$, cuando el dímero se rompe en el umbral de localización. La fase localizada estará de nuevo caracterizada por un decaimiento exponencial de la constante de acoplamiento dímero con una longitud característica igual a la mitad de la longitud de localización en la ecuación de Harper.

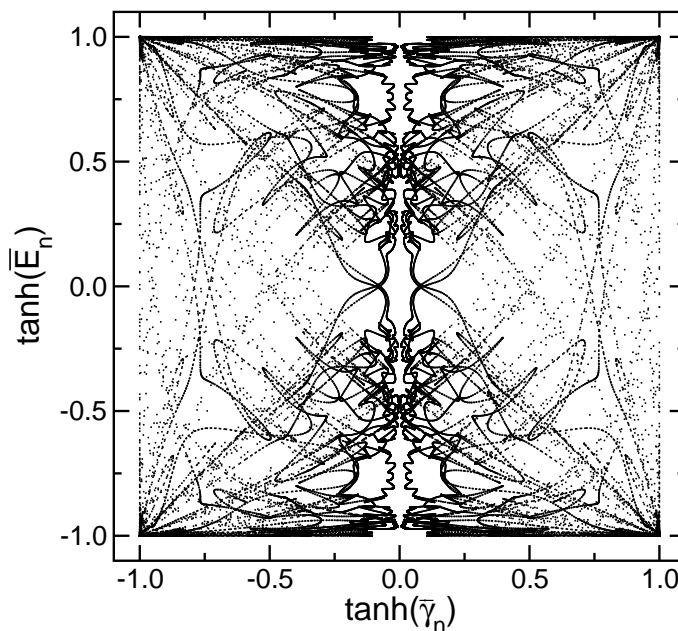


Figura 3.18. Trayectorias en la TD para $\lambda = 0.992$, cerca del punto crítico de la transición ($\lambda = 1$). Aquí λ se expresa en unidades de K , siendo $K = \pi/2$.

3.3. Conductancia

Durante muchos años los experimentos de efecto Hall cuántico han sido comúnmente aceptados como paradigma de las transiciones de fase cuánticas [67], siendo su descripción teórica uno de los mayores éxitos

de la teoría de *escala* [34]. Sorprendentemente se ha descubierto un comportamiento distinto al predicho por la teoría de *escala* en unos recientes experimentos de Shahar *y col.* [68], en los que se mostraba una clara inconsistencia con la descripción que esta teoría hace de la transición Hall cuántica. En ellos se observaba un nuevo régimen de transporte en una gran variedad de muestras para un amplio rango de valores de campo magnético y temperatura. Más recientemente Schaijk *y col.* [69] criticaban los experimentos de Shahar *y col.* [68] y publicaron nuevos datos en los que no aparece rastro alguno del nuevo régimen de saturación de conductancia a bajas temperaturas.

En esta sección pretendemos mostrar un modelo muy simple de transición metal-aislante en la que se encuentra un régimen de saturación de conductancia a bajas temperaturas como el observado en los experimentos de Shahar *y col.* [68]. Además proponemos un experimento de transporte sobre SRGs en las que dicho régimen podría ser observado.

3.3.1. Transición metal-aislante

Experimentalmente la identificación de una fase aislante está basada en la extrapolación de la componente xx del tensor de resistividad a una cierta temperatura T , $\rho_{xx}(T)$, a su valor a temperatura $T = 0$. Este proceso es siempre algo ambiguo. La física subyacente en las transiciones de tipo Hall cuántico es la transición de Anderson localizado-deslocalizado [70]. Entre estados localizados y no localizados existe una región estrecha en la que pueden sobrevivir algunos estados cuasi-localizados —estados con longitud de localización del orden del tamaño del sistema—, en el caso de muestras *finitas* (o de medidas a temperatura *finita*). Estos estados son obviados en las interpretaciones usuales de los datos experimentales, que los consideran irrelevantes para las propiedades de transporte. En esta sección vamos que esto *no* es cierto en un caso muy simple de transición metal-aislante.

El modelo de transición metal-aislante más simple que uno puede imaginar consiste en considerar un sistema cuya curva de transmitividad está dada por la función

$$\tau(E) = \begin{cases} 1, & E \geq E_c, \\ 0, & E < E_c, \end{cases} \quad (3.28)$$

donde E_c es la energía crítica de la transición. Podemos ver esta curva de transmisión en el recuadro de la figura 3.19(a). Calcular la dependencia con la temperatura T de la conductancia G para valores del potencial químico μ por encima y por debajo de la energía crítica E_c , así como la dependencia con el potencial químico μ para distintos valores de T , es inmediato a partir del formalismo de Landauer-Büttiker [15]. Podemos ver estas dependencias en las figuras 3.19(a) y 3.19(b) respectivamente. Además, es posible obtener una expresión analítica para la conductancia a partir de la fórmula de Engquist-Anderson [12]

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \tau(E) dE}{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) [1 - \tau(E)] dE}, \quad (3.29)$$

donde f es la distribución de Fermi

$$f = \frac{1}{e^{(E-\mu)\beta} + 1}, \quad \beta = (k_B T)^{-1}.$$

A partir de (3.28) y (3.29) es posible obtener en el límite de bajas temperaturas, es decir cuando $\beta \gg \delta$, siendo $\delta = \mu - E_c$, la siguiente expresión para la conductancia

$$G \approx \frac{e^2}{h} e^{\delta\beta}. \quad (3.30)$$

La teoría de *escala* implica la existencia de un punto crítico que es independiente de la temperatura T [71]. Este comportamiento es muy similar

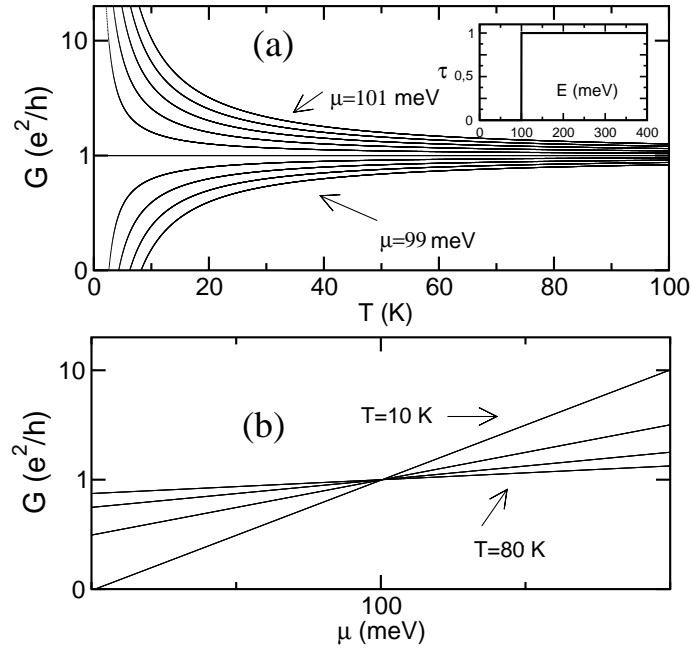


Figura 3.19. Distintas curvas de conductancia en función de la temperatura correspondientes a distintos valores constantes del potencial químico (a), y en función del potencial químico correspondientes a distintos valores constantes de la temperatura (b), en el caso de una transición metal-aislante ideal (ver el recuadro interior mostrando la transición abrupta en el coeficiente de transmisión).

al observado en la figura 3.19, pero no es el mismo dado que una solución analítica de este modelo muestra una región de cruce, de área S , para las curvas de conductancia a distinta temperatura, en lugar de un único punto

$$S \approx \frac{e^2}{h} \frac{E_c}{2} \alpha(T) e^{-\alpha(T)}, \quad (3.31)$$

donde $\alpha(T) = 2E_c\beta$. Como se observa en esta expresión, el area de la región de cruce tiende a cero en el límite $\beta \rightarrow \infty$, en cuyo caso existe acuerdo entre el modelo y la teoría de *escala*.

Se sabe [17] que a bajas temperaturas, si los centros de dispersión

elástica están situados aleatoriamente en el espacio, las fases de las ondas de electrones reflejados serán coherentes e interferirán constructivamente entre sí, aumentando la probabilidad de que un electrón vuelva en el sentido opuesto al de origen, dando como resultado su localización. Este es, precisamente, el caso contrario al de un sistema rigurosamente ordenado, en el que las ondas reflejadas interfieren destructivamente a bajas temperaturas, dando como resultado un comportamiento metálico. Esta reflexión por coherencia de fase será más importante a medida que disminuya la temperatura y los procesos incoherentes de dispersión inelástica sean ‘congelados’, aunque estos no desaparezcan del todo a temperaturas finitas [72]. Para lograr la aparición de las dos fases, en los experimentos habituales de transición metal-aislante normalmente se eligen sistemas como pozos cuánticos de InGaAs en los que el desorden en la aleación es el predominante (átomos de In insertados aleatoriamente en una red de GaAs [69]). Sin embargo, es fundamental señalar que otros procesos incoherentes, como la dispersión por impurezas, dan lugar a la aparición de estados cuasi-localizados en la región entre la fase metálica y la fase aislante, y cuyos efectos son despreciables en el interior de estas fases. La anchura de esta región de estados cuasi-localizados será una función de los detalles de la muestra, pero claramente dependerá de la importancia del papel desempeñado por los procesos de dispersión inelástica.

Teniendo todo esto en consideración, parece claro que un modelo algo más elaborado de la transición metal-aislante que el descrito en la ecuación (3.28), deberá dar cuenta de la existencia de estos estados cuasi-localizados de los que hablamos. Vamos a modificar, por lo tanto, este modelo, considerando que en lugar de una energía crítica E_c , existe una región de anchura 2ω en la que la transmitividad varía de forma *suave*,

en sentido matemático, entre 0 y 1

$$\tau(E) = \begin{cases} 1, & E \geq E_c + \omega, \\ g(E), & E_c + \omega > E > E_c - \omega, \\ 0, & E \leq E_c - \omega. \end{cases} \quad (3.32)$$

Aquí $g(E)$ es una función que varía suavemente entre $E_c - \omega$ y $E_c + \omega$.

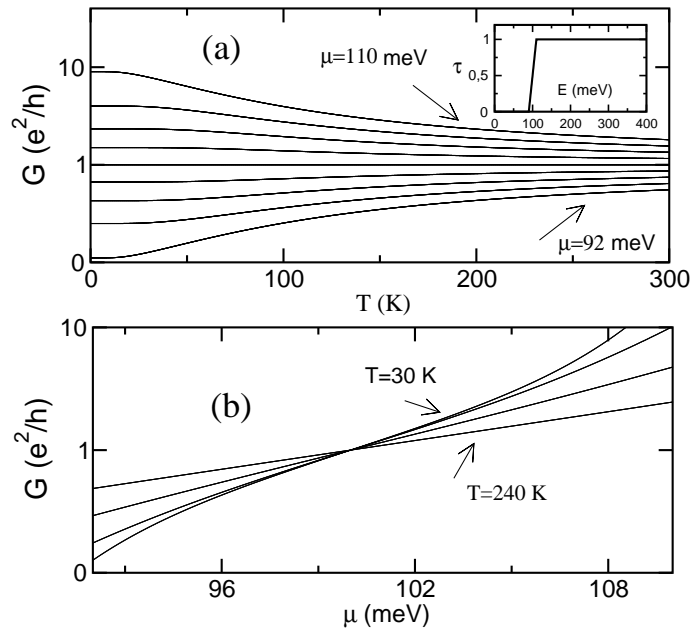


Figura 3.20. Distintas curvas de conductancia en función de la temperatura correspondientes a distintos valores constantes del potencial químico (a), y en función del potencial químico correspondientes a distintos valores constantes de la temperatura (b), en el caso de una transición metal-aislante no ideal (ver el recuadro interior mostrando la transición de anchura distinta de cero en el coeficiente de transmisión).

Con esta definición, el comportamiento asintótico de la conductancia en

el límite de bajas temperaturas puede escribirse de la siguiente forma

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{g(\mu)}{1 - g(\mu)} + \mathcal{O}(T^2). \quad (3.33)$$

De esta expresión se deduce que, cuando se representa en función de la temperatura para distintos valores del potencial químico, la conductancia muestra un *plateau* a bajas temperaturas, saturando a un valor constante en el límite $T \rightarrow 0$. Puede observarse este comportamiento en la figura 3.20. Esta figura muestra un comportamiento muy distinto del esperado en una transición metal-aislante convencional. De hecho, esta figura es completamente inconsistente con la descripción que proporciona la teoría de *escala* aunque, sin embargo, muestra una dependencia compatible con la ley fenomenológica propuesta por Shahar *y col.* [68] para explicar una saturación idéntica observada en sus experimentos.

Como ya hemos mencionado, Schaijk *y col.* han puesto en tela de juicio los resultados de Shahar *y col.*, mostrando nuevos datos en los que no hay indicios de saturación al menos a temperaturas por encima de los 100 mK. En la figura 3.21 mostramos la conductancia en función de T para distintos valores del parámetro ω cuando $g(E) = (E - E_c)/2\omega + 1/2$, es decir en el caso más simple en el que la transmitividad en la región de transición varía linealmente. Como se puede apreciar en la figura una transición metal-aislante como la propuesta en la ecuación (3.32) hace compatibles los resultados de los experimentos de Shahar y Schaijk, dado que, como se observa, el parámetro ω controla la temperatura a la que tiene lugar la saturación en la curva de conductancia. El caso ideal corresponde a un valor $\omega = 0$, para el cual no hay saturación. Sin embargo para valores de ω distintos de cero la saturación en la conductancia aparece a un valor particular de la temperatura T_s que dependerá del valor de ω ; cuanto más pequeño es el valor de ω , más pequeña es la temperatura de saturación T_s .

En el artículo de Shahar *y col.* se mostraron los resultados obteni-

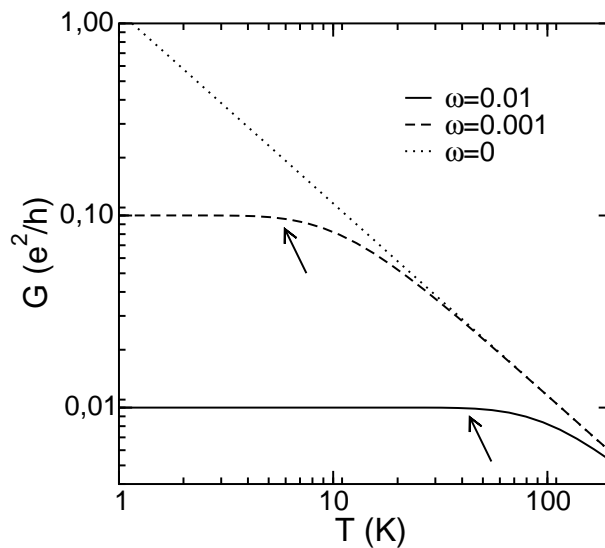


Figura 3.21. Conductancia en función de la temperatura para un valor fijo del potencial químico. En la figura se observa cómo la anchura de la región de transición (ω) en la curva de transmisión determina la temperatura de saturación que se señala con una flecha en cada caso.

dos con una gran variedad de muestras de muy distintos materiales. La saturación se observó en todas ellas pero a temperaturas muy distintas, entre 100 y 500 mK. Como ya hemos discutido anteriormente, cuanto menos importantes son los procesos de dispersión incoherente, más pequeña será la anchura de la región de transición ω y, consecuentemente, más pequeña será la temperatura de saturación observada. Así, para muestras de mayor calidad, en las que la importancia de los procesos de dispersión incoherentes es menor, es posible que la temperatura de saturación se reduzca hasta no resultar observable a las temperaturas experimentalmente accesibles, como en los experimentos de Schaijk *y col.*

La curva de transmitividad en la ecuación (3.28) recuerda a la curva de transmitividad observada en las SRGs en los bordes de las minibandas

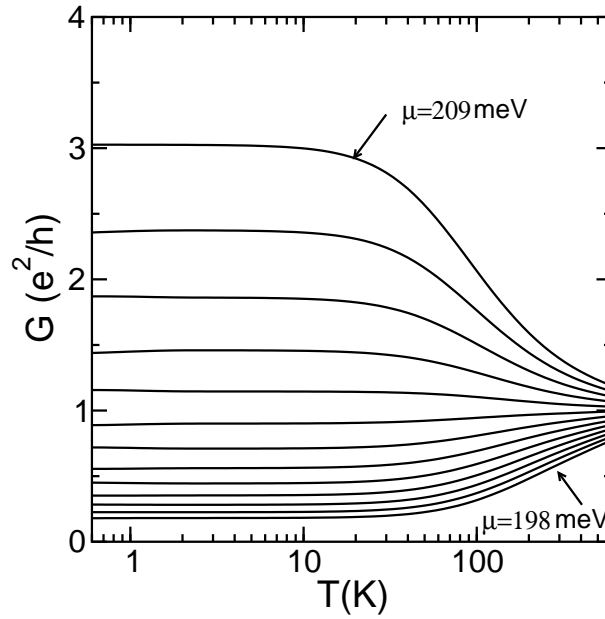


Figura 3.22. Conductancia frente a la temperatura para distintos valores de la energía de Fermi en el caso de una SRG, mostrando la región de saturación. Nótese la escala logarítmica de temperaturas.

(figura 3.4). Esto sugiere que es posible utilizar estas SRs para verificar la existencia de la región saturación en la curva de conductancia frente a temperatura. En la región de bajas temperaturas sólo los electrones próximos al nivel de Fermi contribuyen a la conductancia, de manera que la minibanda de transmisión en una SRG puede considerarse en primera aproximación como semi infinita a energías mayores que $E_c + \omega$ para temperaturas suficientemente bajas, es decir, para temperaturas tales que $\Delta \gg k_B T$, donde Δ es la anchura de la minibanda. En la figura 3.22 mostramos la conductancia en función de la temperatura para distintos valores del nivel de Fermi próximos al borde de la minibanda. Se puede observar como a temperaturas por encima de unos 10 K el sistema tiene el comportamiento predicho por la teoría de *escala* para una

transición metal-aislante, con una conductancia que crece al disminuir la temperatura en la fase metálica, mientras que disminuye con la temperatura en la fase aislante. Sin embargo, a temperaturas por debajo de 10 K es posible observar cómo la conductancia satura a un valor constante que dependerá del valor del potencial químico en el sistema.

3.4. Conclusiones

A continuación, presentamos los principales resultados de este capítulo resumidos en las siguientes conclusiones.

- En este capítulo hemos estudiado las propiedades de transporte electrónico en SRs semiconductoras con modulación de composición, en las que la modulación es de tipo gaussiano (SRGs).
- Hemos calculado la transmitividad de una SRG comparándola con la de una SR convencional (uniforme). La minibanda de transmisión en el caso gaussiano es prácticamente plana, lo que contrasta con las fuertes oscilaciones del coeficiente de transmisión en la SR uniforme. Esto hace de la SRG un buen candidato a dispositivo de filtro pasa banda en energía, con aplicaciones en láseres de cascada.
- Se ha estudiado el efecto del desorden no intencional sobre las propiedades de transmisión de la SRG. Se han considerado dos tipos de desorden, desorden vertical y desorden lateral, mostrándose que es el primero el que tiene un mayor impacto sobre las propiedades de transporte de la SRG.
- Hemos calculado el espectro de energías de la SRG teniendo en cuenta el efecto de la interacción electrón-electrón, utilizando para ello un modelo de campo medio (potencial de Hartree autoconsistente). Hemos comparado el valor teórico obtenido para la posición

del máximo de PL con el obtenido experimentalmente, observando un excelente acuerdo entre estos dos valores.

- Hemos desarrollado una técnica de renormalización para estudiar SRGs con barreras de tipo delta. Dicha técnica ha resultado ser de utilidad para estudiar la transición localizado-deslocalizado en otro tipo de sistemas, como los descritos, por ejemplo, por la ecuación de Harper.
- Finalmente hemos estudiado un modelo de transición metal-aislante que puede explicar la región de saturación observada en la curva de conductancia frente a temperatura en ciertos experimentos de efecto Hall cuántico cuyos resultados son inconsistentes con la teoría convencional de *escala*. Hemos propuesto la SRG como sistema físico en el que observar dicha saturación en la curva de conductancia.

CAPÍTULO 4

Heteroestructuras con desorden intencionado

4.1. Introducción

Desde que Anderson publicó su famoso artículo [17], la localización electrónica en sistemas desordenados ha sido un activo tema de investigación. Recordemos que fue conjeturado por Mott y Twose [18], demostrado rigurosamente en algunos sistemas por Ziman [32], y argumentado de forma general por Abrahams *y col.* [8], que en el caso de un modelo con parámetros totalmente aleatorios (desordenados), todos los estados están localizados en 1 y 2 dimensiones. Sin embargo, hoy en día es bien sabido que pueden aparecer estados extendidos en sistemas aleatorios en los que el desorden exhibe correlaciones de corto [19–21, 37–39, 74–83] o largo [84, 85] alcance. Estas correlaciones en el desorden implican que la variables aleatorias del sistema no son independientes entre sí dentro de una determinada longitud de correlación.

Recientemente ha crecido de forma notable el interés en las condiciones bajo las cuales tiene lugar la supresión de la localización de An-

derson debido a la presencia de correlaciones en el desorden. Debido a la escasez de confirmaciones experimentales, hay aún cierta controversia acerca de la importancia de estos resultados y de su aplicación física. Los grandes avances experimentados por la nanotecnología han permitido el crecimiento de SRs de semiconductores con propiedades físicas *a medida*, lo que abre la posibilidad de verificar experimentalmente las predicciones teóricas al respecto de la deslocalización debida a las correlaciones en el desorden. En esta línea, Chomette *y col.* [86] sugirieron la localización de Anderson como responsable del aumento en la intensidad de la fotoluminiscencia observada en SRs con desorden intencionado. Por otro lado, Diez *y col.* [39–41] conjeturaron que las llamadas SRs con pozos constituyendo dímeros (SPD), deberían mostrar un incremento en la conductancia debido a las correlaciones de corto alcance en el desorden. Algunos años después de esta propuesta, la supresión de la localización debida a las correlaciones en SPDs fue usada de nuevo para explicar las medidas de transporte observadas en SRs de este tipo, crecidas en GaAs-Al_xGa_{1-x}As, por Bellani *y col.* [22].

En este capítulo pretendemos estudiar la existencia de estados electrónicos extendidos en heteroestructuras semiconductoras con desorden correlacionado. Comenzaremos por introducir una técnica analítica de carácter bastante general, que ya fue usada en el estudio de fonones en SRs desordenadas [87], basada en el formalismo de la matriz de transferencia, al problema de la localización de estados electrónicos en una clase de aleaciones binarias [88], por ser este sistema más fácilmente tratable desde un punto de vista matemático. A continuación aplicaremos este mismo formalismo a la obtención de la condición de existencia para la aparición de estados extendidos en SRs con dos tipos de desorden correlacionado [89]. Finalmente estudiaremos la presencia de estados extendidos en SRs de tipo binario con desorden correlacionado, las SRs con barreras constituyendo dímeros (SBD), en las que observaremos la aparición simultánea de dos tipos de estados deslocalizados cuyo origen

será discutido en detalle [90].

4.2. Aleaciones binarias

Con la finalidad de introducir la técnica analítica que usaremos para el estudio de estados extendidos en sistemas unidimensionales desordenados [87], vamos a estudiar una aleación binaria unidimensional con dos clases de átomos, aniones y cationes, de manera que los aniones se encuentran en las posiciones impares de una cadena, y los cationes en las pares. Este sistema puede asimilarse a un modelo sencillo de aleación binaria semiconductor como pueda ser compuesto ternario de los grupos III-V. En estas aleaciones —digamos $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ —, una subred está ocupada por un único tipo de catión —digamos el As—, mientras que en la otra subred los aniones —digamos Ga y Al— están situados alternándose de forma aleatoria. Modelizaremos este sistema mediante una ecuación de tipo *enlace fuerte* en la que denotaremos la energía del sitio n por ϵ_n . La fuente de desorden en el sistema bajo estudio será la fluctuación estocástica de la energía de sitio en las posiciones impares. En las posiciones pares la energía de sitio es la misma y podemos asumir, sin pérdida de generalidad, que ésta es igual a cero. La ecuación que describirá el sistema es

$$(E - \epsilon_n)\psi_n + \psi_{n+1} + \psi_{n-1} = 0, \quad n = 1, 2, \dots, \mathcal{N}, \quad (4.1)$$

donde E es la autoenergía correspondiente a cada uno de los estados del sistema y $\mathcal{N} \equiv 2N$ es el número total de átomos. Supondremos de aquí en adelante que las energías $\{\epsilon_{2n-1}\}_{n=1}^N$ son un conjunto de variables aleatorias no correlacionadas distribuidas de forma normal con valor medio v y varianza σ^2 . En lo que sigue denotaremos σ como *grado de desorden*.

Con estas definiciones tenemos que los correladores

$$\langle \epsilon_{2n-1} \rangle = v, \quad \langle \epsilon_{2n-1} \epsilon_{2n'-1} \rangle = (v^2 + \sigma^2) \delta_{nn'}, \quad (4.2)$$

La ecuación (4.1) puede ser reescrita a partir de la matriz de promoción 2×2 , P_n , como sigue

$$\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -E + \epsilon_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \equiv P_n \begin{pmatrix} \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Iterando esta ecuación es posible relacionar (ψ_n, ψ_{n+1}) con (ψ_0, ψ_1) haciendo $\psi_0 \equiv 0$

$$\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n+1} \end{pmatrix} = \prod_{k=n}^1 P_k \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \end{pmatrix} \equiv M_n \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

donde M_n denota la matriz de transferencia. Definiremos $T_n \equiv P_{2n} P_{2n-1}$ como la matriz de promoción para la celda unidad diatómica en la cadena unidimensional, y trabajaremos con ella en lugar de la matriz de promoción de un sólo átomo por razones de conveniencia. Con esta definición podemos escribir la matriz de transferencia total del sistema como $M_N = \prod_{n=N}^1 T_n$. Para valores reales de E y ϵ_n , la matriz de promoción T_n puede ser considerada como un elemento del grupo $SO(1,2)$, que es *isomorfo* al grupo $SL(2, \mathbb{R})$. Por ello T_n puede ser expresada en términos de las matrices de Pauli, σ_μ , como sigue

$$\begin{aligned} T_n = & \left[\frac{E}{2} (E - \epsilon_{2n-1}) - 1 \right] \mathcal{I}_2 - \frac{E}{2} (E - \epsilon_{2n-1}) \sigma_3 \\ & + \frac{\epsilon_{2n-1}}{2} \sigma_1 + i \left(E - \frac{\epsilon_{2n-1}}{2} \right) \sigma_2, \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde \mathcal{I}_m denota la matriz unidad de orden $m \times m$. Además se puede demostrar fácilmente la siguiente propiedad $T_n^{-1} = \sigma_2 T_n^\dagger \sigma_2$. Por último

será también de utilidad el teorema de Oseledec [91], que afirma que la siguiente matriz límite existe

$$\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(M_N^\dagger M_N \right)^{1/2N}, \quad (4.6)$$

con autovalores e^γ .

4.2.1. Condición de existencia de estados extendidos

Estamos interesados en calcular la longitud de localización del sistema, dado que a partir de ésta obtendremos información acerca del carácter extendido o localizado de los autoestados. Utilizando la fórmula para la descomposición del producto de dos estados de espín 1/2 en suma de estados escalares y de espín 1, tenemos

$$(T_j)_{\alpha'}^\alpha (T_j^{-1})_\beta^{\beta'} = \frac{1}{2} (\delta)_\beta^\alpha (\delta)_{\alpha'}^{\beta'} + \frac{1}{2} (\sigma^\mu)_{\alpha'}^{\beta'} \Lambda_j^{\mu\nu} (\sigma^\nu)_\beta^\alpha, \quad (4.7)$$

donde

$$\Lambda_j^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \text{Tr} (T_j \sigma^\mu T_j^{-1} \sigma^\nu) \quad (4.8)$$

es la parte de espín 1 en la suma. Multiplicando la expresión (4.7) a la derecha y a la izquierda por σ_2 tenemos

$$(T_j)_{\alpha'}^\alpha (T_j^+)_{\beta}^{\beta'} = \frac{1}{2} (\sigma_2)_\beta^\alpha (\sigma_2)_{\alpha'}^{\beta'} + \frac{1}{2} (\sigma^\mu \sigma_2)_{\alpha'}^{\beta'} \Lambda_j^{\mu\nu} (\sigma^\nu \sigma_2)_\beta^\alpha. \quad (4.9)$$

A partir de esta última expresión es posible calcular el valor de la matriz Γ en (4.6). Si consideramos una distribución estocástica de energías como en (4.2) es posible obtener el valor medio de Γ calculado sobre dicha distribución

$$\langle \Gamma \rangle = \frac{1}{2} \sigma_2 \otimes \sigma_2 + \frac{1}{2} (\sigma^\mu \sigma_2) \otimes (\sigma^\nu \sigma_2) \left(\prod_{j=1}^N \langle \Lambda_j \rangle \right)^{\mu\nu}, \quad (4.10)$$

donde Λ_j está definido como en (4.8). De acuerdo con el ya citado teorema de Oseledec [91], el exponente de Lyapunov para una cierta energía E , que es igual a la inversa de la longitud de localización λ^{-1} , donde λ viene dado en unidades de la celda unidad —diatómica—, estará dado por

$$\lambda^{-1} = \ln[\xi(E)], \quad (4.11)$$

donde $\xi(E)$ es el autovalor de $\langle \Lambda_j \rangle$ más próximo a la unidad. Tras algo de álgebra se obtienen los elementos de $\langle \Lambda_j \rangle$ que están dados por

$$\begin{aligned} \langle \Lambda_j^{11} \rangle &= \frac{1}{2} \left(2 + E^4 + 4Ev - 2E^3v - \sigma^2 - v^2 \right. \\ &\quad \left. + (\sigma^2 + v^2 - 4)E^2 \right), \\ \langle \Lambda_j^{12} \rangle &= -\frac{i}{2} \left(E^4 - 2E^3v + \sigma^2 + v^2 + (\sigma^2 + v^2 - 2)E^2 \right), \\ \langle \Lambda_j^{13} \rangle &= -E^3 - v + 2E^2v - (\sigma^2 + v^2 - 2)E, \\ \langle \Lambda_j^{21} \rangle &= \frac{i}{2} \left(E^4 + 4Ev - 2E^3v - \sigma^2 - v^2 \right. \\ &\quad \left. + (\sigma^2 + v^2 - 2)E^2 \right), \\ \langle \Lambda_j^{22} \rangle &= \frac{1}{2} \left(2 + E^4 - 2E^3v + \sigma^2 + v^2 + (\sigma^2 + v^2)E^2 \right), \\ \langle \Lambda_j^{23} \rangle &= -i \left(E^3 + v - 2E^2v + (\sigma^2 + v^2)E \right), \\ \langle \Lambda_j^{31} \rangle &= -2E + E^3 + v - E^2v, \\ \langle \Lambda_j^{32} \rangle &= -i \left(E^3 - v - E^2v \right), \\ \langle \Lambda_j^{33} \rangle &= 1 - 2E^2 + 2Ev. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Los estados deslocalizados tienen longitud de localización infinita y, por tanto, a una cierta energía, la matriz $\langle \Lambda_j \rangle$ debe tener un autovalor igual a uno. De esta manera llegamos a la siguiente condición para la aparición

de estados deslocalizados

$$\det \left[\mathcal{I}_3 - \langle \Lambda_j \rangle \right] = -2\sigma^2 E^2 = 0, \quad (4.13)$$

por lo que existe un estado deslocalizado cuando $E = 0$. Este resultado está apoyado por el hecho de que el estado con $E = 0$ es solución a la ecuación (4.1) para una cadena infinita en la que $\psi_{2n+1} + \psi_{2n-1} = 0$, de manera que se extiende uniformemente a lo largo de toda la red dado que la amplitud de probabilidad en los sitios impares $|\psi_{2n+1}|^2$ permanece constante.

4.2.2. Longitud de localización

Como vemos, encontrar en el modelo que nos ocupa el estado extendido con $E = 0$ no requiere de toda la herramienta matemática que hemos empleado hasta ahora. Sin embargo, todos los desarrollos anteriores sí nos van a servir para el estudio de modelos más complejos y, en este caso, para poder obtener de forma analítica el comportamiento de la longitud de localización en función de la energía. Para ello podemos desarrollar la ecuación (4.11) en serie de potencias de E en torno a $E = 0$. El resultado es

$$\lambda^{-1} = \begin{cases} -\frac{\sigma^2}{4v} E + \mathcal{O}(E^2), & E < 0, \\ 2v^{1/2} E^{1/2} + \mathcal{O}(E^{3/2}), & E > 0, \end{cases} \quad (4.14)$$

para $v > 0$. Nótese que la longitud de localización es asimétrica en un entorno de la energía del estado extendido dado que escala como $\sim E$ por la izquierda, y como $\sim E^{1/2}$ por la derecha. La situación es justo la contraria en el caso en el que $v < 0$. Además es importante señalar que el prefactor para $E < 0$ depende del grado de desorden de la aleación, mientras que para $E > 0$ es independiente de σ . En el caso en que el sistema es ordenado ($\sigma = 0$), la aleación es simplemente una cadena periódica diatómica con energías de sitio 0 y v en cada celda unidad y,

consecuentemente, habrá dos bandas permitidas. La banda de energías más bajas se extiende desde $v/2 - (v^2/4 + 4)^{1/2}$ hasta 0, mientras que la banda de energías más altas se extiende desde v hasta $v/2 + (v^2/4 + 4)^{1/2}$ para $v > 0$. En este caso todos los autoestados son funciones de Bloch que se extienden sobre la cadena completa. La localización tiene lugar tan pronto como se introduce una pequeña cantidad de desorden en el sistema

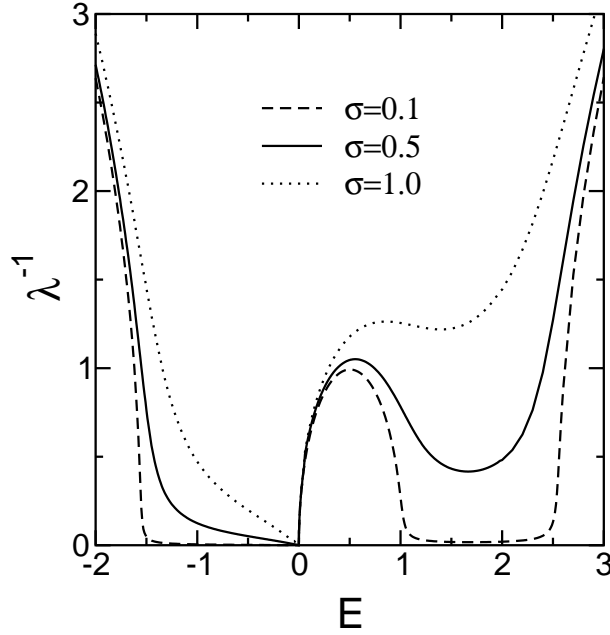


Figura 4.1. Inversa de la longitud de localización en función de la energía cuando $v = 1$ y $\sigma = 0,1,0,5$ y $1,0$. Nótese que $\lambda \rightarrow \infty$ en $E = 0$.

pero, de acuerdo con los anteriores resultados, el estado con $E = 0$ permanece extendido. Esto puede observarse claramente en la figura 4.1, donde representamos la inversa de la longitud de localización obtenida a partir de la expresión (4.11) en función de la energía con $v = 1$ para distintos valores del grado de desorden σ . En todos los casos la inversa de la longitud de localización es distinta de cero excepto para $E = 0$, en

donde $\lambda^{-1} = 0$. Como ya hemos comentado esto indica la existencia de un estado deslocalizado a esta energía, si admitimos localización exponencial. En la siguiente sección abordaremos la discusión de la existencia de estados extendidos en el caso de sistemas finitos, es decir, aquellos con longitud de localización mayor que el tamaño del sistema.

4.2.3. Resultados numéricos

Para confirmar los anteriores resultados analíticos hemos diagonalizado numéricamente la ecuación (4.1) con condiciones de contorno fijas. Fundamentalmente centraremos nuestro estudio numérico en la densidad de estados normalizada (densidad de estados por unidad de longitud) $\rho(E)$, y en el grado de localización (razón inversa de participación, IPR) $IPR(E)$ de un determinado estado con energía E . Estas cantidades se definen respectivamente como [92]

$$\rho(E) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left\langle \sum_k \left(\frac{1}{R} \right) \theta \left[\frac{R}{2} - |E - E_k| \right] \right\rangle, \quad (4.15)$$

$$IPR(E) = \frac{1}{\mathcal{N}\rho(E)} \left\langle \sum_k \left(\frac{1}{R} \right) \theta \left[\frac{R}{2} - |E - E_k| \right] \left(\sum_{n=1}^{\mathcal{N}} a_{kn}^4 \right) \right\rangle, \quad (4.16)$$

donde el promedio $\langle \dots \rangle$ está definido sobre un conjunto de cadenas lineales desordenadas, a_{kn} es el autovector de (4.1) correspondiente al autovalor E_k con $k = 1, 2, \dots, \mathcal{N}$, R es la resolución espectral, y θ es la función paso de Heaviside. Para estados extendidos a lo largo de todo el sistema la IPR se comporta como $1/\mathcal{N}$. En concreto, para autoestados de la red periódica, la IPR puede calcularse de forma exacta, siendo su valor 0 en el límite $\mathcal{N} \rightarrow \infty$. En el caso de estados localizados, en dicho límite, la IPR toma valores mayores, siendo su valor 1 en el caso extremo en que el autoestado se encuentra localizado en un único sitio de la red.

Hemos realizado todos los cálculos para $v = 1$ estudiando varios va-

lores del grado de desorden σ en el intervalo de 0,1 a 1,0. El mayor valor para el grado de desorden que consideramos aquí es tal que las fluctuaciones típicas de la energía de sitio son del orden de la constante de acoplo entre próximos vecinos. El número máximo de átomos en la cadena es $\mathcal{N} = 1000$ (500 celdas unidad), aunque se han estudiado también sistemas mayores para comprobar que nuestros resultados son independientes del tamaño del sistema. Los resultados se obtienen como un promedio sobre 100 realizaciones del desorden para cada par dado de valores v y σ . La resolución espectral es de $R = 4 \times 10^{-3}$, más que suficiente para nuestros propósitos.

A continuación vamos a comentar los resultados que hemos obtenido numéricamente. La figura 4.2 muestra la densidad de estados para dos valores distintos del grado de desorden ($\sigma = 0,1$ y $1,0$) cuando el tamaño de sistema es $\mathcal{N} = 1000$ y $v = 1$. La densidad de estados presenta la habitual forma de U dentro de las bandas cuando el grado de desorden es pequeño. Las singularidades en el límite de las bandas permitidas se suavizan y desaparecen al aumentar el grado de desorden excepto a $E = 0$, energía para la que la divergencia permanece incluso para el valor más grande del grado de desorden ($\sigma = 1,0$). Este resultado sugiere que el estado con $E = 0$ es deslocalizado.

La IPR muestra un incremento global cuando el grado de desorden aumenta, lo que significa que cuanto mayor es el grado de desorden menor es la longitud de localización. Esto se observa claramente en la figura 4.3, donde mostramos la IPR en función de la energía para los mismos parámetros que en la figura 4.1. Puede observarse que el incremento de la IPR depende fuertemente de la energía, siendo más acusado cerca del centro de las dos bandas permitidas. Como podría esperarse, la IPR para $E = 0$ resulta ser independiente del grado de desorden, mientras que no lo es del tamaño del sistema aunque esto último no se muestra en la figura. Esta peculiaridad pone de manifiesto el carácter extendido del estado con $E = 0$. Es destacable la buena correspondencia que existe entre la figura

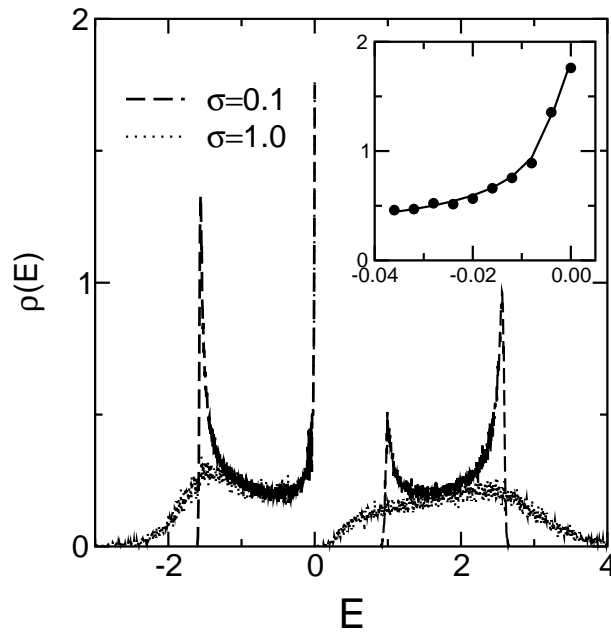


Figura 4.2. Densidad de estados en función de la energía para $\mathcal{N} = 1000$, $v = 1$ y grados de desorden $\sigma = 0,1$ y $1,0$. El recuadro interior muestra aumentada la región próxima al borde superior de la banda más baja para $\sigma = 1,0$. La curva en dicho recuadro es el ajuste a $\sqrt{-E}$.

4.1 (resultado analítico) y la figura 4.2 (resultado numérico).

Desde un punto de vista matemático, la ecuación (4.14) demuestra la existencia de un único estado extendido en *sistemas infinitos*. Sin embargo, la divergencia de la longitud de localización λ para la energía resonante supone que varios estados presenten longitud de localización mayor que el tamaño del sistema en el caso de un sistema finito. Podemos calcular de forma aproximada el número de dichos estados a partir de ciertas consideraciones básicas: observando la divergencia de la densidad de estados a la energía resonante (figura 4.2), está claro que existen estados próximos al borde superior de la banda inferior incluso en presencia

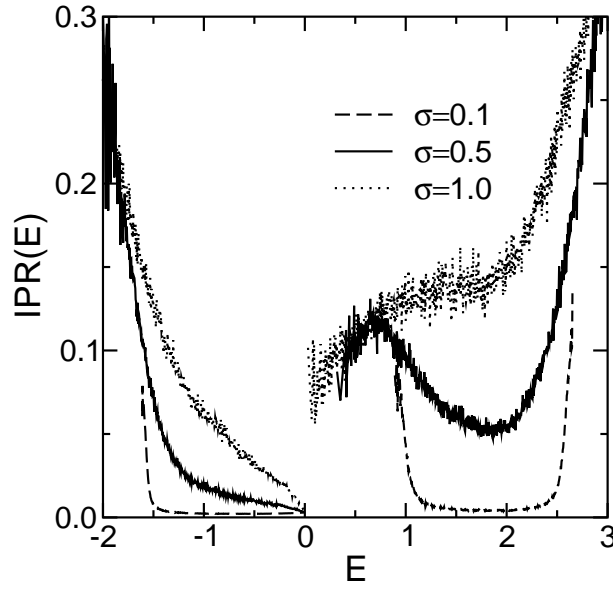


Figura 4.3. IPR para los mismos casos mostrados en la figura 4.1. Nótese el aumento global de la IPR al incrementar el grado de desorden excepto para $E = 0$.

de desorden. Podemos admitir que, al igual que en el caso periódico, la densidad de estados diverge como $\rho \sim 1/\sqrt{-E}$ cerca de borde superior de la banda inferior *incluso* en el caso de sistemas desordenados (ver el recuadro interior en la figura 4.2). Se deduce fácilmente de la ecuación (4.14) que la longitud de localización es mayor que el tamaño del sistema para aquellos estados cuya energía yace en el intervalo comprendido entre $E = E_c \equiv -4v/N\sigma^2$ y $E = 0$. El número de dichos estados es entonces

$$\int_{E_c}^0 \mathcal{N} \rho(E) dE \sim \sqrt{\mathcal{N}}.$$

Por tanto, llegamos finalmente a la conclusión de que la longitud de localización de $\sim \sqrt{\mathcal{N}}$ estados es mayor que el tamaño del sistema. Es interesante señalar que un comportamiento similar fue encontrado en el

modelo *random dimer* [19].

4.3. Superredes con desorden correlacionado

En esta sección vamos a utilizar la técnica analítica que hemos empleado en el caso de la aleación binaria, aplicándola al estudio de la localización de estados electrónicos en SRs fabricadas con GaAs-Al_xGa_{1-x}As, con desorden intencional correlacionado. En concreto, pretendemos estudiar los estados electrónicos de dos tipos distintos de SRs desordenadas. Los dos modelos de desorden considerados son:

- El espesor de las láminas de GaAs es constante e igual a d_p , mientras que el espesor de las láminas de Al_xGa_{1-x}As viene dado por una variable aleatoria distribuida uniformemente entre 0 y un valor d_b .
- De nuevo el espesor de las láminas de GaAs es constante e igual a d_p pero ahora el espesor de las láminas de Al_xGa_{1-x}As alterna entre un valor fijo y un valor aleatorio.

Encontraremos en ambos casos las condiciones para la energía que en caso de ser satisfechas implican la existencia de algún estado deslocalizado. Para ello, partiremos para la descripción matemática de los estados electrónicos en estas SRs de una ecuación tipo Ben Daniel-Duke para la función envolvente en el marco de la aproximación de la masa efectiva. La ecuación, en el caso de tener invariancia traslacional en el plano normal a la dirección de crecimiento, se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} \right] + V(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (4.17)$$

donde $m^*(z)$ es la masa efectiva dependiente de la posición. Definimos el cuadrado del momento electrónico en GaAs como $\kappa^2 \equiv 2m_p^*E/\hbar$, donde m_p^* es la masa efectiva en GaAs. Por otro lado $\eta^2 \equiv 2m_b^*(E - V)/\hbar$, donde

m_b^* es la masa efectiva en $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y V la diferencia entre los límites de la banda de conducción de GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Con estas definiciones la matriz de transferencia T_j que relaciona las soluciones de la ecuación (4.17) entre dos periodos consecutivos en la SR, entendiendo un periodo como el conjunto de una lámina de GaAs (pozo) y otra de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (barrera), se puede escribir como

$$T_j = \begin{pmatrix} \alpha_j & \beta_j \\ \beta_j^* & \alpha_j^* \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_j &= \left[\frac{i}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} + \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right) \sin(\kappa d_p) + \cos(\kappa d_p) \right] e^{i\eta d_b^j}, \\ \beta_j &= \frac{i}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} - \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right) \sin(\kappa d_p) e^{-\eta d_b^j}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

siendo d_b^j la anchura de la barrera j -ésima. Consideraremos las SRs bajo estudio como formadas por un conjunto de N periodos pozo-barrera.

El problema del transporte de portadores en una dimensión para una amplia clase de modelos de desorden fue tratado en la referencia [93] dentro del formalismo de la matriz de transferencia y se obtuvieron algunos resultados de carácter general. En particular se demostró que la matriz de transferencia continua para problemas unidimensionales, que pertenece al grupo $\text{SL}(2, \mathbb{R})$, puede ser usada para calcular de forma exacta cantidades como la resistividad. Ésta última puede obtenerse, siguiendo las referencias [10, 28, 93], a partir de la expresión

$$\rho = \frac{1 - \tau}{\tau} = T_{12} T_{21}^*, \quad (4.20)$$

donde T_{12} y T_{21} son los elementos no diagonales de la matriz de transferencia total del sistema T . Es fácil demostrar que las matrices T_j que aparecen en la ecuación (4.18) pertenecen al grupo $\text{SL}(2, \mathbb{R})$ y por tanto

la ecuación (4.7) usada en el caso de la aleación binaria es válida también en este caso. Dado que estamos interesados en calcular la resistividad en la ecuación (4.20), y en esta aparecen productos de elementos de T y T^\dagger , la expresión (4.7) no es útil y debemos transformarla de alguna forma. Es inmediato comprobar la siguiente propiedad

$$\sigma_3 T^{-1} \sigma_3 \equiv T^\dagger. \quad (4.21)$$

Multiplicando (4.7) a derecha e izquierda por la matriz σ_3 finalmente obtenemos

$$(T_j)_{\alpha'}^\alpha (T_j^\dagger)_{\beta}^{\beta'} = \frac{1}{2} (\sigma_3)_\beta^\alpha (\sigma_3)_{\alpha'}^{\beta'} + \frac{1}{2} (\sigma^\mu \sigma_3)_{\alpha'}^{\beta'} \Lambda_j^{\mu\nu} (\sigma^\nu \sigma_3)_\beta^\alpha. \quad (4.22)$$

A partir de esta última expresión y de la ecuación (4.20) es inmediato calcular la resistividad. Recordando la definición de las matrices Λ_j dada en la ecuación (4.8) podemos escribir

$$\rho = \frac{1}{2} \left[-1 + \left(\prod_{j=1}^N \Lambda_j \right)^{33} \right], \quad (4.23)$$

de manera que ρ sólo depende del elemento $\{3, 3\}$ de la parte espín 1 del producto directo de matrices de transferencia. Esta expresión resulta ser de un notable interés por el hecho de ser multiplicativa en $\Lambda_j^{\mu\nu}$, $j = 1, 2, \dots, N$, cada una de las cuales depende únicamente de los parámetros locales en el periodo j -ésimo de la SR.

4.3.1. Condición de existencia de estados extendidos

Como se desprende de la forma de la expresión (4.23), debido a la forma multiplicativa de la dependencia de la resistividad de Landauer en los parámetros locales, es posible promediar sobre distintos tipos de desorden correlacionado de forma relativamente sencilla.

Sustituyendo la expresión (4.18) para la matriz de transferencia en la ecuación (4.8) obtenemos las siguientes expresiones para los elementos de Λ_j

$$\begin{aligned}
\Lambda_j^{11} &= \cos(2\kappa d_p) \cos(2\eta d_b^j) - \cosh(\theta) \sen(2\eta d_b^j) \sen(2\kappa d_p), \\
\Lambda_j^{12} &= [\cosh^2(\theta) \cos(2\kappa d_p) - \senh^2(\theta)] \sen(2\eta d_b^j) \\
&\quad + \cosh(\theta) \cos(2\eta d_b^j) \sen(2\kappa d_p), \\
\Lambda_j^{13} &= -i \senh(\theta) [\cos(2\eta d_b^j) \sen(2\kappa d_p) \\
&\quad - \cosh(\theta) [1 - \cos(2\kappa d_p)] \sen(2\eta d_b^j)], \\
\Lambda_j^{21} &= -\sen(2\eta d_b^j) \cos(2\kappa d_p) - \cosh(\theta) \cos(2\eta d_b^j) \sen(2\kappa d_p), \\
\Lambda_j^{22} &= [\cosh^2(\theta) \cos(2\kappa d_p) - \senh^2(\theta)] \cos(2\eta d_b^j) \\
&\quad - \cosh(\theta) \sen(2\kappa d_p) \sen(2\eta d_b^j), \\
\Lambda_j^{23} &= i \senh(\theta) [\sen(2\kappa d_p) \sen(2\eta d_b^j) + \cosh(\theta) [1 - \cos(2\kappa d_p)]], \\
\Lambda_j^{31} &= i \senh(\theta) \sen(2\kappa d_p), \\
\Lambda_j^{32} &= i \senh(2\theta) [1 - \cos(2\kappa d_p)]/2, \\
\Lambda_j^{33} &= \cosh^2(\theta) - \senh^2(\theta) \cos(2\kappa d_p), \tag{4.24}
\end{aligned}$$

en donde, por simplicidad, hemos definido

$$\cosh(\theta) = \frac{1}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} + \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right). \tag{4.25}$$

Como anticipamos, cada una de las d_b^j es una variable aleatoria distribuida uniformemente entre 0 y d_b para los dos modelos de desorden que vamos a estudiar. Para obtener el promedio estadístico de las distintas componentes de Λ , tendremos en cuenta que con la citada distribución

de probabilidad se satisface

$$\begin{aligned} a &\equiv \langle \cos(2\eta d_2^j) \rangle = \frac{\text{sen}(2d_b\eta)}{2d_2\eta}, \\ b &\equiv \langle \text{sen}(2\eta d_2^j) \rangle = \frac{\text{sen}^2(d_2\eta)}{d_2\eta}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Tomando promedios también en la ecuación (4.23) tenemos

$$\langle \rho \rangle = \frac{1}{2} [-1 + (\langle \Lambda \rangle^N)^{33}]. \quad (4.27)$$

Para tamaños grandes del sistema, en el régimen $N \gg 1$, la resistividad debe comportarse como $e^{\Gamma N}$ [28, 94, 95], donde el coeficiente de Lyapunov Γ nos proporciona la longitud de correlación. Usando la ecuación (4.27) y la definición del coeficiente de Lyapunov $\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \rho / N$, podemos obtener una expresión exacta para la longitud de localización λ , que resulta ser

$$\Gamma = \lambda^{-1} = \ln \xi, \quad (4.28)$$

donde ξ es el autovalor de $\langle \Lambda \rangle$ en el caso del primer modelo de desorden, o de $\Lambda \langle \Lambda \rangle$ en el caso del segundo, más próximo a la unidad. Aquí Λ es la matriz cuyos elementos están dados por (4.24) con anchura de la barrera fija e igual a d_b . Los estados electrónicos estarán localizados o no dependiendo del comportamiento de λ . Si para un estado electrónico a una energía dada la longitud de localización se hace infinita, en general se tratará de un estado deslocalizado [96] y la expresión (4.28) muestra que esto sucederá cuando $\xi(E) = 1$. Será por tanto necesario calcular los determinantes

$$\begin{aligned} &\det(1 - \langle \Lambda \rangle) \\ &\det(1 - \Lambda \langle \Lambda \rangle), \end{aligned} \quad (4.29)$$

para encontrar las condiciones de estados extendidos en cada uno de los

modelos propuestos de desorden correlacionado. Para el primero de los dos determinantes obtenemos

$$\det [1 - \langle \Lambda \rangle] = \frac{1}{2} \sin^2(d_p \kappa) \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} - \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right)^2 (a^2 + b^2 - 1), \quad (4.30)$$

lo que conduce a la siguiente condición para tener un estado extendido

$$\sin(d_p \kappa) = 0. \quad (4.31)$$

Por otro lado para el segundo determinante se tiene

$$\begin{aligned} \det(1 - \Lambda \langle \Lambda \rangle) &= \cos(\kappa d_p) \cos(\eta d_b) \\ &- \frac{1}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right) \sin(\kappa d_p) \sin(\eta d_b), \end{aligned} \quad (4.32)$$

de manera que la condición ahora para que exista un estado extendido es

$$\cos(\kappa d_p) \cos(\eta d_b) = \frac{1}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} + \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right) \sin(\kappa d_p) \sin(\eta d_b). \quad (4.33)$$

4.3.2. Resultados numéricos

Con la finalidad de verificar los resultados analíticos obtenidos con el anterior formalismo, hemos realizado extensivos cálculos numéricos que permiten mostrar la existencia de los estados extendidos discutidos anteriormente. Vamos a dirigir nuestra atención al modelo de desorden en el que la anchura de todas las barreras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ fluctúa aleatoriamente, calculando en este modelo el coeficiente de transmisión del sistema como una función de la energía para un tamaño N fijo, y como una función del tamaño N para una energía fija. Se ha calculado el coeficiente de transmisión del sistema mediante el formalismo de la matriz

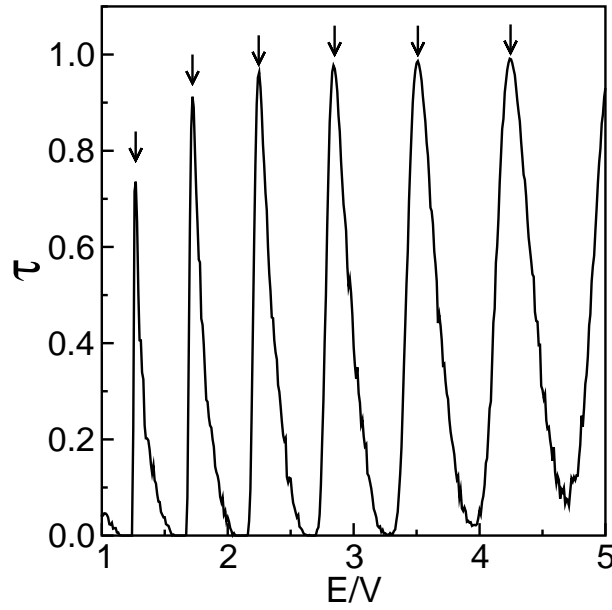


Figura 4.4. Coeficiente de transmisión τ en función de la energía reducida E/V . Las flechas muestran las energías dadas por la ecuación (4.34). La altura y la anchura nominal de las barreras son, respectivamente, $V = 0,4$ eV y $d_b = 15$ Å, mientras que la anchura de los pozos es $d_p = 200$ Å, y el número de periodos es $N = 200$.

de transferencia [3, 52].

La figura 4.4 muestra el coeficiente de transmisión calculado en función de la energía reducida E/V para estados por encima de la barrera. Los parámetros estructurales elegidos para el cálculo son los siguientes: $d_p = 200$ Å, $d_b = 15$ Å, $V = 0,4$ eV, y $N = 200$. Las flechas se encuentran colocadas a las energías dadas por la relación (4.31) y que pueden expresarse como sigue

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_p^* d_p^2}, \quad (4.34)$$

donde n es un número entero. En la figura puede verse claramente que estas energías coinciden con las resonancias estrechas que aparecen en la

curva del coeficiente de transmisión.

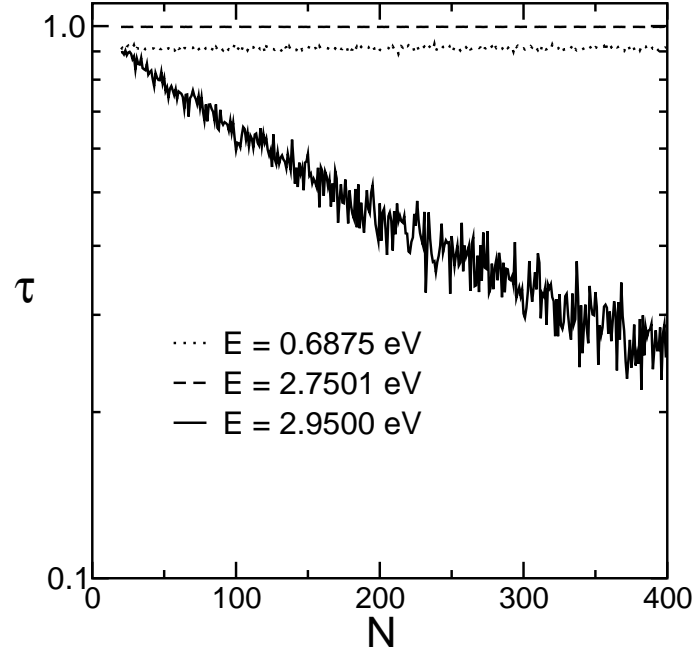


Figura 4.5. Coeficiente de transmisión en función del tamaño del sistema N . Las líneas punteada y discontinua corresponden, respectivamente, a $n = 7$ y $n = 14$ en la ecuación (4.34). La línea continua se corresponde a una energía de $E = 2,95$ eV, situada entre $n = 14$ y $n = 15$. Los parámetros estructurales son los mismos que en la figura 4.4.

Para comprobar si las energías dadas por (4.34) se corresponden con auténticos estados extendidos o no, hemos representado en la figura 4.5 el coeficiente de transmisión para un par de ellas en función del tamaño del sistema N , y lo hemos comparado con el coeficiente de transmisión para una energía cualquiera que yace entre dos de las resonancias. Para las energías en (4.34) el coeficiente de transmisión permanece constante en función del tamaño N , siendo este comportamiento el esperado para un estado extendido. Por el contrario, para un estado con energía en-

tre dos cualquiera de las resonancias el coeficiente de transmisión decae exponencialmente.

4.4. Superredes binarias con desorden correlacionado

La técnica analítica utilizada en las dos secciones anteriores, aunque de carácter general, no es de aplicación sencilla en cualquier modelo de desorden correlacionado. En particular en el caso de SRs binarias, es decir, aquellas en las que uno de los parámetros estructurales de la SR puede tomar únicamente dos valores de forma aleatoria, puede resultar más provechoso atacar el problema de alguna forma más directa aunque menos sistemática.

En esta sección nos proponemos estudiar la existencia de estados extendidos en SBDs fabricadas con GaAs-AlGaAs. En estas SRs las alturas de las barreras (la diferencia en energía entre los límites de la banda de conducción en GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) toma dos posibles valores de forma totalmente aleatoria en cada periodo —porción de la SR formada por una barrera y la mitad del pozo anterior y el posterior—, salvo que cuando aparece la barrera más alta lo hace en pares formando lo que denominaremos un *dímero*. Un sistema similar al que planteamos, en el que el parámetro binario es la anchura de los pozos en lugar de la altura de las barreras, las SPDs, ha sido estudiado de forma extensiva en las referencias [39–41]. En la figura 4.6 mostramos el perfil de la banda de conducción de una SBD.

Para la descripción matemática de nuestro sistema partimos, tal y como hicimos en la sección anterior, de un hamiltoniano de Ben Daniel-Duke para la función envolvente. Al igual que entonces, la ecuación (4.17) nos servirá para estudiar estados próximos al borde de la banda de conducción en las proximidades del valle Γ . Vamos a llamar V_j ($j = 1, 2, \dots, N$, donde N es el número de periodos de la SR), a la altura de la barrera correspondiente al periodo j . Las V_j podrán tomar

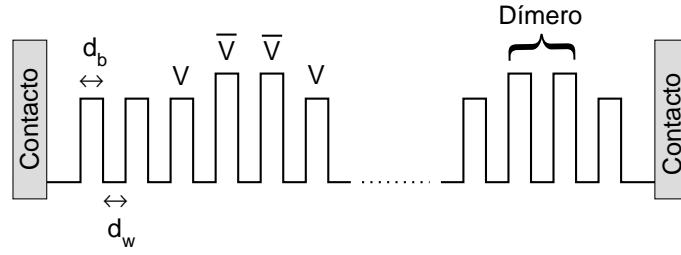


Figura 4.6. Vista esquemática del perfil del borde de la banda de conducción de una SBD, en la que se aprecia la presencia de dos tipos de barreras con alturas V y \bar{V} , apareciendo las de altura \bar{V} siempre en pares (dímeros).

dos valores distintos, V y \bar{V} , dependiendo del valor x o \bar{x} de la fracción molar de aluminio en $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, y lo harán de forma aleatoria salvo por el hecho de que siempre que aparezca \bar{V} lo hará en dos periodos consecutivos. Sin pérdida de generalidad, en lo que sigue supondremos que $V < \bar{V}$ y nos fijaremos exclusivamente en los estados electrónicos con energías por debajo de la barrera más baja V . Entonces el cuadrado del momento electrónico de la j -ésima barrera se puede escribir como $\eta_j^2 = 2m_{b,j}^*(V_j - E)/\hbar^2$, donde $m_{b,j}^*$ es la masa efectiva electrónica en dicha barrera. Con la definición de periodo ligeramente distinta a la de la sección anterior, y considerando estados con $E < V$, podemos reescribir los elementos de la matriz de transferencia (4.18) como sigue

$$\begin{aligned}\alpha_j &= \left[\cosh(\eta_j d_b) + \frac{i}{2} \left(\frac{m_{b,j}^* \kappa}{m_p^* \eta_j} - \frac{m_p^* \eta_j}{m_{b,j}^* \kappa} \right) \sinh(\eta_j d_b) \right] e^{i\kappa d_p} \\ \beta_j &= -\frac{i}{2} \left(\frac{m_{b,j}^* \kappa}{m_p^* \eta_j} + \frac{m_p^* \eta_j}{m_{b,j}^* \kappa} \right) \sinh(\eta_j d_b) e^{-i\kappa d_p}.\end{aligned}\quad (4.35)$$

El momento electrónico en la j -ésima barrera puede tomar dos valores, η y $\bar{\eta}$, al igual que la masa efectiva que toma valores m_b^* o \bar{m}_b^* , según la fracción molar de aluminio sea x o \bar{x} .

4.4.1. Estados extendidos

En el caso de SPDs [40] se ha demostrado que existe un estado extendido cuando $\text{Re}(\alpha_d) = 0$ y $|\text{Tr}(T_r)| \leq 2$, donde

$$\alpha_d = \left[\cosh(\eta d_b) + \frac{i}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} - \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right) \sinh(\eta d_b) \right] e^{i\kappa \bar{d}_p},$$

siendo \bar{d}_p la anchura de cada pozo cuántico constituyente de un dímero, y T_r es la matriz de transferencia para el periodo de una SR no dimérica, es decir aquella en la que $d_{p,j} = d_p, \forall j$. Es posible obtener de forma directa condiciones similares para la existencia de estados extendidos en el caso de las SRs con dímeros en las barreras. Estas condiciones resultan ser formalmente las mismas, aunque la expresión para α_d varía ligeramente

$$\alpha_d = \left[\cosh(\bar{\eta} d_b) + \frac{i}{2} \left(\frac{\bar{m}_b^* \kappa}{m_p^* \bar{\eta}} - \frac{m_p^* \bar{\eta}}{\bar{m}_b^* \kappa} \right) \sinh(\bar{\eta} d_b) \right] e^{i\kappa d_p}. \quad (4.36)$$

De las anteriores condiciones se deducen las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} |\cosh(\eta d_b) \cos(\kappa d_p) - \xi_- \sinh(\eta d_b) \sin(\kappa d_p)| &\leq 1, \\ \cosh(\bar{\eta} d_b) \cos(\kappa d_p) - \bar{\xi}_- \sinh(\bar{\eta} d_b) \sin(\kappa d_p) &= 0. \end{aligned} \quad (4.37)$$

para energías por debajo de la barrera mas baja. En estas últimas ecuaciones hemos definido por brevedad

$$\xi_{\pm} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{m_b^* \kappa}{m_p^* \eta} \pm \frac{m_p^* \eta}{m_b^* \kappa} \right) \quad \bar{\xi}_{\pm} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\bar{m}_b^* \kappa}{m_p^* \bar{\eta}} \pm \frac{m_p^* \bar{\eta}}{\bar{m}_b^* \kappa} \right).$$

La energía para la que las dos condiciones (4.37) se satisfacen (si es que existe) se corresponde con un estado extendido en la SR uniforme con un único defecto de tipo dimérico. Llamaremos energía de resonancia *dimérica*, E_d , a esta energía. Más adelante demostraremos numéricamente que, de hecho, esta energía se corresponde con la de un estado extendido

en una SR con un conjunto de dímeros distribuidos aleatoriamente a lo largo de ella.

Además de la anterior energía de resonancia debida a la existencia de correlaciones de corto alcance de tipo dimérico, las SRs con dímeros en las barreras presentan otro tipo de resonancia debido a correlaciones de tipo binario. Consideremos una SR formada por dos tipos de barreras distribuidas de forma aleatoria. Es evidente que los efectos de la aleatoriedad serán eliminados cuando las posiciones de dos barreras cualesquiera puedan ser intercambiadas para un cierto valor de la energía. En el caso de que esto suceda, al existir únicamente dos tipos de barreras, es posible desplazar todas las barreras de un tipo a cada lado. Podemos ilustrar este proceso esquemáticamente

$$V\bar{V}V\bar{V}V\bar{V}V\bar{V}V\bar{V} \longrightarrow V\bar{V}V\bar{V}V\bar{V}V\bar{V}V\bar{V}.$$

Este argumento puede aplicarse al caso de las SRs con dímeros en las barreras dentro del formalismo de la matriz de transferencia, considerando que la condición de intercambio de dos barreras etiquetadas por los índices i y j es matemáticamente equivalente a la condición de que las matrices de transferencia T_i y T_j conmuten entre sí (un argumento similar ha sido utilizado para el estudio de estados críticos en sistemas de Fibonacci [97]). En concreto, dado que sólo existen dos tipos de barreras, con alturas V y \bar{V} , podemos escribir la condición de conmutación de matrices de transferencia como $[T, \bar{T}] = 0$, siendo T la matriz de transferencia asociada a un periodo de la SR con una barrera de altura V , y \bar{T} la matriz de transferencia asociada a un periodo de la SR con una barrera de altura \bar{V} . Esta condición de conmutación conduce a las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \text{Im}(\beta\bar{\beta}^*) &= 0, \\ \bar{\beta}\text{Im}(\alpha) &= \beta\text{Im}(\bar{\alpha}). \end{aligned} \tag{4.38}$$

donde α, β son los elementos de la matriz de transferencia T , mientras que $\bar{\alpha}, \bar{\beta}$ son los elementos de la matriz de transferencia \bar{T} . En el caso de la SR con dímeros en las barreras estas dos condiciones pueden satisfacerse simultaneamente, dado que la primera de ellas se reduce a una identidad, mientras que la segunda proporciona la siguiente ecuación trascendente

$$\frac{\xi_+ \sinh(\eta d_b)}{\bar{\xi}_+ \sinh(\bar{\eta} d_b)} = \frac{\cosh(\eta d_b) \sin(\kappa d_p) + \xi_- \sinh(\eta d_b) \cos(\kappa d_p)}{\cosh(\bar{\eta} d_b) \sin(\kappa d_p) + \bar{\xi}_- \sinh(\bar{\eta} d_b) \cos(\kappa d_p)}. \quad (4.39)$$

Para poder tener un estado extendido a la energía que es solución de la ecuación (4.39), esta energía debe yacer dentro de las minibandas de las SRs formadas únicamente con barreras de altura V o de altura \bar{V} , es decir

$$|\text{Tr}(T)| \leq 2, \quad |\text{Tr}(\bar{T})| \leq 2. \quad (4.40)$$

De aquí en adelante llamaremos energía de resonancia *conmutativa*, E_c , a la energía que es solución de las ecuaciones (4.39) y (4.40).

4.4.2. Resultados numéricos

Para determinar si las energías E_d y E_c corresponden a auténticos estados extendidos hemos realizado un estudio numérico. En la figura 4.7 mostramos el coeficiente de transmisión de una SBD hecha de GaAs-Al_xGa_{1-x}As con los siguientes parámetros estructurales $d_b = 25 \text{ \AA}$, $d_p = 25 \text{ \AA}$, $x = 0,33$ y $\bar{x} = 0,44$. La fracción de barreras de altura \bar{V} es el 30 % del número total de barreras. Con estos parámetros puede observarse como aparecen dos resonancias en el coeficiente de transmisión próximas a los bordes de la minibanda. Las energías a las que aparecen estas resonancias resultan ser aquellas obtenidas resolviendo las ecuaciones (4.37) y (4.39), (4.40). Las soluciones son $E_d \simeq 0,140\text{eV}$ y $E_c \simeq 0,212\text{eV}$ para las resonancias *dimérica* y *conmutativa* respectivamente. En la figura 4.8 representamos la dependencia del coeficiente de transmisión con el tamaño del sistema para diversas energías. Puede verse que las curvas de

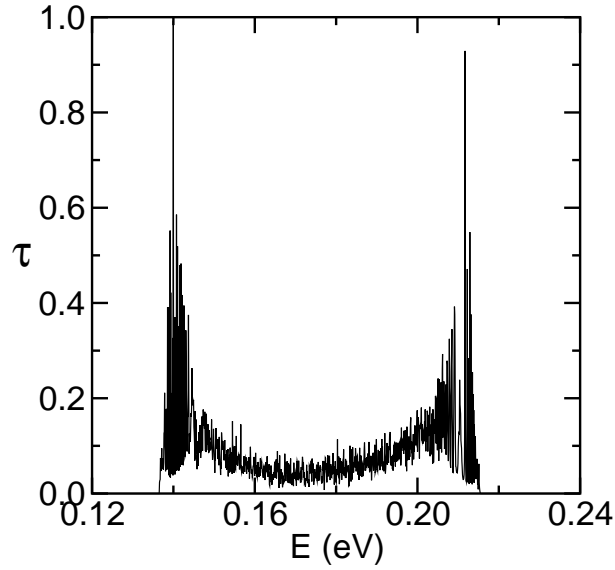


Figura 4.7. Coeficiente de transmisión en función de la energía para una SR con dímeros en las barreras con $d_b = 25 \text{ \AA}$, $d_p = 25 \text{ \AA}$, $x = 0,33$ y $\bar{x} = 0,44$ y $N = 1000$ periodos. El número de barreras de altura \bar{V} es el 30 % del total. Se observa la aparición de dos resonancias con energías $E = E_d \simeq 0,140 \text{ eV}$ y $E = E_c \simeq 0,212 \text{ eV}$.

E_d y E_c tienen pendiente cero, siendo esto consecuencia de una longitud de localización infinita. Mientras, lejos de las resonancias, observamos que los estados tienen longitud de localización finita. Esto sugiere que las energías obtenidas a partir de las ecuaciones (4.37) y (4.39), (4.40) corresponden de hecho a dos tipos distintos de estados extendidos. Puede también observarse en la figura el efecto del desorden no intencionado sobre las resonancias. Con el fin de comprobar si nuestros resultados son aplicables a SRs reales, en las que es inevitable la presencia de cierto grado de desorden no intencionado debido a la rugosidad en las intercaras entre distintos materiales, hemos permitido en nuestros cálculos que la anchura de pozos y barreras fluctúe aleatoriamente de la forma que explicamos en el capítulo anterior [40]. La anchura de las láminas teniendo

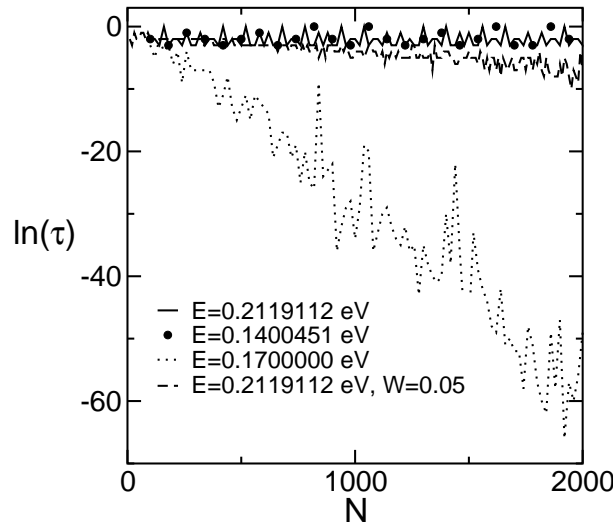


Figura 4.8. Dependencia del coeficiente de transmisión en función con el tamaño del sistema (número de periodos N). La línea continua y los círculos se corresponden con E_c y E_d respectivamente, mientras que la línea a trazos se corresponde con $E = 0,170$ eV. La línea de puntos se corresponde con una SR con desorden no intencional a la energía E_c , en la que la anchura de las barreras y los pozos fluctúa un 1 % en torno a sus valores medios.

en cuenta la fluctuación con la que modelizamos la rugosidad puede expresarse como $d_i(1 + W\epsilon)$, donde $d_i = d_b, d_p$ es la anchura nominal de la capa, W es un parámetro adimensional que mide el grado de desorden no intencionado y ϵ es una variable aleatoria distribuida uniformemente entre $-1/2$ y $1/2$. La figura 4.8 muestra que la rugosidad en las intercaras hace que el estado electrónico correspondiente a la resonancia *conmutativa* se localice. En la figura hemos considerado $W = 0,05$, es decir, fluctuaciones que en promedio son del orden del 1 % de la anchura de la lámina. En la figura es posible observar que la longitud de localización es suficientemente grande como para permitir la posible comprobación experimental de la existencia de las resonancias *dimérica* y *conmutativa*

en SRs con un elevado control estructural en las que la rugosidad en las intercaras es pequeña.

Es importante señalar que los estados extendidos de tipo *conmutativo* que estamos describiendo no son característicos de las SBDs, en el sentido de que las correlaciones de tipo dimérico no son en absoluto necesarias para su aparición. Esto significa que cualquier SR con una distribución binaria en la altura de las barreras que satisfaga la siguiente función de correlación $\langle V_n V_m \rangle = V^2 \delta_{nm}$ debería mostrar el mismo tipo de estado extendido. Así, debemos enfatizar que, debido a la existencia de dos tipos de correlaciones en la distribución de valores de unos de los parámetros estructurales de la SR, hemos encontrado un sistema en el que aparecen dos tipos de estados extendidos, siendo sus orígenes totalmente distintos: uno de ellos se debe a las correlaciones diméricas de corto alcance, mientras que el otro surge de la naturaleza conmutativa de las matrices de transferencia que describen el sistema a ciertas energías.

Realmente el tipo de resonancias *conmutativas* que hemos descrito parecen ser ubíquas en estructuras de tipo binario. Por ejemplo, una condición similar a la encontrada en el caso de la SBDs se puede obtener en el caso de las SPDs. En estas SRs se encuentra que una nueva resonancia aparece cuando se satisface la condición

$$\kappa(\bar{d}_p - d_p) = \pi. \quad (4.41)$$

Aquí n es un entero, y \bar{d}_w y d_p son las anchuras de los dos tipos de pozos cuánticos en la SR. Otro ejemplo de esta clase de resonancias es el modelo de Kronig-Penney binario y aleatorio con barreras de potencial de tipo delta. En este modelo las condiciones de conmutación (4.39) conducen a la misma energía de resonancia encontrada por Ishii [98] y discutida por Hilke y Flores [99].

Concluimos esta sección con algunos comentarios acerca de la posibilidad de observación de los estados extendidos estudiados en SRs con

desorden intencional. Se ha demostrado [22] que la existencia de estados extendidos en SPDs se pone de manifiesto en medidas de transporte a baja temperatura. En particular la resistividad de una muestra de este tipo con una elección adecuada de los parámetros, y una muestra ordenada (periódica), hechas de $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, muestran un *plateau* a baja temperatura, mientras que este *plateau* está ausente cuando se relaja la restricción *dimérica*, es decir, cuando los dos tipos de pozos se disponen aleatoriamente pero sin formar pares. Nuestra conjetura es que el mismo tipo de medidas puede llevarse a cabo en SBDs para determinar el auténtico carácter extendido de los estados *conmutativos* los cuales, en esta clase de SRs, son más fáciles de situar dentro de la minibanda. Sin embargo las medidas de resistividad serán, probablemente, incapaces de separar los efectos de estados *diméricos* y *conmutativos*, de manera que se hará necesaria una selección cuidadosa de los parámetros estructurales de la SR con el fin de situar la resonancia *dimérica* fuera de la minibanda, dejando la *conmutativa* dentro de ésta. De este modo las desviaciones en el comportamiento de la resistividad respecto al valor obtenido para la SR ordenada serán sólo achacables a la presencia de un estado extendido de tipo *conmutativo*.

4.5. Conclusiones

A continuación presentamos los principales resultados de este capítulo resumidos en las siguientes conclusiones.

- En este capítulo hemos estudiado la existencia de estados extendidos en SRs desordenadas con desorden intencional correlacionado.
- Para el estudio de estados extendidos en sistemas con desorden correlacionado hemos comenzado por aplicar la técnica analítica que utilizamos posteriormente en el caso de las SRs, al caso de una

aleación binaria, por ser este más sencillo desde un punto de vista algebraico.

- En el caso de la aleación binaria hemos demostrado la existencia de un estado deslocalizado para sistemas infinitos. Se ha obtenido, además, una expresión aproximada para la longitud de localización en un entorno de la energía a la que aparece el estado extendido. Por último se han mostrado resultados numéricos de densidad de estados e IPR, que sugieren la existencia de $\sim \sqrt{N}$ estados extendidos en el caso de un sistema finito, donde N es el tamaño del sistema. Esto último es importante desde un punto de vista experimental, dado que las propiedades de transporte en sistemas reales (finitos) estarán influenciadas por la existencia de estos estados con longitud de localización mayor que el tamaño del sistema.
- El mismo método analítico utilizado en el caso de la aleación binaria se ha usado para estudiar SRs semiconductoras con dos tipos de desorden correlacionado. Se han encontrado expresiones para la energía de las resonancias de transmisión y se ha demostrado numéricamente en uno de los dos tipos de desorden que estas resonancias en la energía coinciden con estados electrónicos extendidos de la SR. Las resonancias de transmisión encontradas numéricamente son anchas en energía, lo que sugiere longitudes de localización grandes para las energías próximas a las energías resonantes encontradas analíticamente, y por tanto la posibilidad de que las propiedades de transporte en la SR se vean afectadas por la existencia de estados con longitud de localización mayor que el tamaño del sistema.
- Hemos estudiado la existencia de estados extendidos en SBDs. En este tipo de SRs en las que uno de los parámetros estructurales puede tomar dos valores de forma aleatoria, se han encontrado dos

tipos de resonancias de transmisión. El origen de una de ellas está en las correlaciones de corto alcance de tipo dimérico, mientras que el origen de la otra se encuentra en la naturaleza conmutativa de las matrices de transferencia que describen el sistema. Finalmente se ha demostrado numéricamente la naturaleza extendida de los estados electrónicos correspondientes a las energías de las resonancias de transmisión encontradas.

CAPÍTULO 5

Heteroestructuras con desorden no intencionado

5.1. Introducción

Desde la aparición de diversos métodos de crecimiento epitaxial, como la MBE, ha sido posible el desarrollo de dispositivos basados en heteroestructuras de semiconductores de alta calidad cristalina, caracterizados por una baja presencia de defectos e impurezas, así como por un elevado control de la rugosidad en las intercaras entre los distintos materiales. Con todo, es inevitable la aparición de irregularidades durante el crecimiento de estos dispositivos, de manera que se hace necesario un tratamiento teórico que investigue los efectos de estas imperfecciones estructurales sobre sus propiedades ópticas y de transporte.

Se han dedicado diversos trabajos al estudio teórico de las propiedades de la estructura y transporte electrónicos en superredes, tanto en estado estacionario [72, 100, 101] como dependientes del tiempo [102], y en heteroestructuras de doble barrera [103, 104], en las que está presente algún tipo de desorden no intencionado. Así mismo, se han desarrollado

diversas técnicas numéricas y analíticas para tratar este tipo de problemas, basadas en formalismos del tipo matriz de transferencia [105], o en el formalismo de las funciones de Green [106, 107]. Aunque estos métodos pueden resultar convenientes desde un punto de vista analítico o computacional, las aproximaciones necesarias para simular la presencia de desorden hacen de ellos modelos poco realistas.

Si bien hasta la fecha se han desarrollado algunos modelos unidimensionales para estudiar la propagación de paquetes de ondas en multicapas rugosas, en las que el desorden se introduce a través de un potencial que es una función aleatoria de una única coordenada [108], estos modelos fallan a la hora de describir sistemas con un pequeño número de capas (por ejemplo heteroestructuras de doble barrera). En este capítulo nos proponemos desarrollar una herramienta teórica para tratar de forma más realista, mediante un modelo bidimensional, el desorden presente en las heteroestructuras de semiconductores que se crecen hoy en día. Una vez desarrollada esta herramienta, la utilizaremos para estudiar cómo afecta la rugosidad en las intercaras entre distintos materiales, así como la falta de homogeneidad en las concentraciones de Al que aparecen durante el proceso de crecimiento epitaxial, al transporte electrónico en heteroestructuras de doble barrera de GaAs-Al_xGa_{1-x}As [109, 110]. Posteriormente pasaremos a estudiar la formación de minibandas en matrices bidimensionales (superredes) de puntos cuánticos de GaAs-In_xGa_{1-x}As, y cómo el desorden debido a la falta de homogeneidad en el tamaño o la forma de los puntos, o a la desviación de la posición de los puntos respecto a una ordenación periódica, afecta a dicha formación de minibandas y a la conductancia en estos sistemas [111].

5.2. Modelo de transporte

En lo que sigue consideraremos heteroestructuras de semiconductores conectadas a dos contactos en las que, modificando el nivel de Fermi en

cada uno de los contactos, es posible inyectar electrones en una dirección u otra (con la aplicación de un campo eléctrico, por ejemplo). El potencial de la heteroestructura, actuando como centro dispersor de los electrones inyectados en el sistema, va a determinar el comportamiento de magnitudes como la conductancia o la corriente eléctrica.

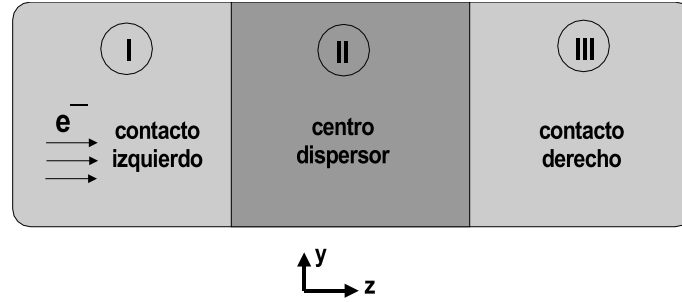


Figura 5.1. Vista esquemática del sistema bajo estudio. Las regiones I y III son los contactos izquierdo y derecho respectivamente, mientras que los electrones sólo sufren procesos de dispersión en la región II.

Para nuestros propósitos vamos a considerar la ecuación de Schrödinger bidimensional para un único electrón en un modelo de una banda dentro de la aproximación de masa efectiva. En las proximidades del valle Γ esta aproximación conduce a una ecuación tipo Ben Daniel–Duke para la función envolvente de la siguiente forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(y, z) \right] \psi(y, z) = E\psi(y, z). \quad (5.1)$$

siendo z la coordenada en la dirección de crecimiento (ver figura 5.1). Por simplicidad consideraremos, en lo que sigue, una masa efectiva constante m^* en el punto Γ a lo largo de toda la heteroestructura. Esto no representa una seria limitación, dado que la ecuación (5.1) puede ser fácilmente modificada de manera que incluya una masa efectiva dependiente de la posición. Con la finalidad de resolver numéricamente esta ecuación vamos

a definir una malla en el espacio con distancias entre nodos en los ejes y e z dadas por a_y y a_z respectivamente. Si ahora definimos las constantes $t_y \equiv -\hbar^2/(2m^*a_y^2)$ y $t_z \equiv -\hbar^2/(2m^*a_z^2)$ y tomamos diferencias finitas en la ecuación (5.1) llegamos a la siguiente versión discreta de la misma

$$t_z(\psi_{n+1,m} + \psi_{n-1,m}) + t_y(\psi_{n,m+1} + \psi_{n,m-1}) + (U_{n,m} - 2t_z - 2t_y)\psi_{n,m} = E\psi_{n,m}. \quad (5.2)$$

Aquí el término de energía potencial $U_{n,m}$ es debido a la diferencia de energía entre los bordes de la banda de conducción en los materiales que componen la heteroestructura.

Para resolver esta ecuación de tipo enlace fuerte utilizaremos el método de la matriz de transferencia. Si dividimos nuestro sistema en rodajas (o regiones del sistema con índice n constante) a lo largo del eje z podemos utilizar la solución —conocida— en una de estas rodajas para calcular la solución —desconocida— en la siguiente. Definamos el vector

$$\phi_n \equiv \begin{pmatrix} \psi_{n,1} \\ \psi_{n,2} \\ \vdots \\ \psi_{n,M} \end{pmatrix}, \quad n = 0, 1, \dots, N+1, \quad (5.3)$$

donde M y $N+1$ son el número de divisiones de la malla en las direcciones y y z respectivamente, y la matriz $\mathcal{M}_n = \mathcal{R}_n + \mathcal{B}_n$. \mathcal{R}_n es una matriz tridiagonal cuyos elementos diagonales son $(\mathcal{R}_n)_{mm} = U_{n,m} - 2t_z - 2t_y$ y los no diagonales son iguales a t_y . \mathcal{B}_n es una matriz que depende de las condiciones de contorno elegidas en la dirección y . Si elegimos, como haremos en lo sucesivo, condiciones de contorno periódicas, tendremos que $(\mathcal{B}_n)_{1,M} = (\mathcal{B}_n)_{M,1} = t_y$, siendo el resto de los elementos cero. Con estas definiciones es posible reescribir la ecuación (5.2) en forma matricial

como sigue

$$\begin{pmatrix} \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_z^{-1}(E\mathcal{I} - \mathcal{M}_n) & -\mathcal{I} \\ \mathcal{I} & \mathcal{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_n \\ \phi_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

donde \mathcal{I} y \mathcal{O} son las matrices identidad y cero, respectivamente, de dimensiones $M \times M$. Esta última expresión nos permite relacionar por iteración las amplitudes de las funciones envolventes en rodajas no consecutivas. En particular podemos obtener la expresión para las amplitudes de las funciones envolventes en el contacto izquierdo en función de las amplitudes en el derecho

$$\begin{pmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \end{pmatrix} = \mathcal{T}^{(N)} \begin{pmatrix} \phi_N \\ \phi_{N+1} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

donde

$$\mathcal{T}^{(N)} \equiv \prod_{n=1}^N \begin{pmatrix} t_z^{-1}(E\mathcal{I} - \mathcal{M}_n) & -\mathcal{I} \\ \mathcal{I} & \mathcal{O} \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

es la matriz de transferencia asociada a la heteroestructura.

Como ya ha sido indicado, nuestro objetivo es resolver el problema de la dispersión de electrones que inciden sobre la heteroestructura desde uno de los contactos. En lo que sigue consideraremos electrones incidiendo sobre la heteroestructura desde el contacto izquierdo (zona I en la figura 5.1). Las funciones envolventes en los contactos estarán determinadas por las condiciones de contorno los mismos. Estas condiciones de contorno son abiertas en la dirección de crecimiento z y, como se anticipó, son periódicas en y . Entonces, en la dirección de crecimiento, las soluciones son ondas planas, mientras que en la dirección normal existirá una discretización de la energía. Como consecuencia de esta discretización aparece un número finito de *canales* transversales igual al número de puntos en la dirección y de la malla. En equilibrio se tiene que $U_{n,m} = 0$ en los contactos, e imponiendo $\psi_{n,1} = \psi_{n,M+1}$, es posible encontrar una

solución particular a la ecuación (5.2) de la forma

$$\psi_{n,m}^l = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_l}} \exp\left(i \frac{2\pi l}{M} m\right) \exp(ik_l a_z n) \quad l = 1, 2, \dots, M, \quad (5.7)$$

donde \mathcal{N}_l es una constante de normalización necesaria para que todos los distintos modos *propagantes* transporten la misma corriente de probabilidad. Esta constante de normalización está dada por

$$\mathcal{N}_l = \frac{1}{a_y^2} \sin^2\left(\frac{2\pi l}{M}\right) + \frac{1}{a_z^2} \sin^2(k_l a_z). \quad (5.8)$$

Es importante notar que estamos considerando una dependencia del momento en la dirección z con el índice l . Este hecho es una consecuencia de haber asumido implícitamente que todos los procesos de dispersión en la región II son elásticos, de manera que la energía se conserva. Para una energía dada se tendrá

$$k_l = \frac{1}{a_z} \cos^{-1} \left\{ \frac{1}{2t_z} \left[E - 2t_y \left(\cos \frac{2\pi l}{M} - 1 \right) \right] + 1 \right\}. \quad (5.9)$$

Con estas consideraciones podemos ahora escribir una solución general para el problema de dispersión de un electrón que incide con energía E sobre la región II a través del canal transversal l . En el contacto izquierdo, es decir, para $(m, n) \in \text{I}$, esta solución será de la forma

$$\begin{aligned} \psi_{n,m}^l &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_l}} \exp\left(i \frac{2\pi l}{M} m\right) \exp(ik_l a_z n) \\ &+ \sum_{j=1}^M \hat{r}_{lj} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(-ik_j a_z n), \end{aligned} \quad (5.10a)$$

mientras que en el contacto derecho, con $(m, n) \in \text{III}$, tendremos

$$\psi_{n,m}^l = \sum_{j=1}^M \hat{t}_{lj} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(ik_j a_z n). \quad (5.10b)$$

Las matrices \hat{r} y \hat{t} que aparecen en estas dos soluciones son la matrices de *reflexión* y *transmisión*, y son las responsables de la *mezcla* de canales debida a la dispersión por el potencial de la heteroestructura. De esta manera, \hat{r}_{ij} representa la amplitud de probabilidad de que un electrón incidiendo en el canal i sea reflejado en el canal j . De la misma manera \hat{t}_{ij} representa la amplitud de probabilidad de que un electrón que incida en el canal i se transmita a través de la heteroestructura saliendo en el canal j . En este punto, la solución en la región II es desconocida. Realmente no estamos interesados en esta solución, dado que toda la física del problema de dispersión de electrones por el potencial de la heteroestructura está contenido en las matrices de *mezcla* \hat{r} y \hat{t} . En lo que sigue nuestro principal objetivo será relacionar los elementos de \hat{r} y \hat{t} con los de la matriz de transferencia $\mathcal{T}^{(N)}$ que aparece en la ecuación (5.6), dado que estos últimos son conocidos.

Comenzaremos reescribiendo formalmente la ecuación (5.2) como $\mathcal{H}\psi = E\psi$. A continuación vamos a realizar la siguiente transformación sobre las funciones envolventes

$$\tilde{\psi} = \hat{t}^{-1}\psi. \quad (5.11)$$

Es fácil ver que el hamiltoniano \mathcal{H} es invariante bajo dicha transformación, esto es, $\tilde{\mathcal{H}} \equiv \hat{t}^{-1}\mathcal{H}\hat{t} = \mathcal{H}$. Que es así es evidente dado que, formalmente, \hat{t} y \mathcal{H} conmutan entre sí por actuar sobre espacios vectoriales diferentes. El hecho de que \mathcal{H} sea un invariante implica que $\mathcal{T}^{(N)}$ no se ve afectada por la transformación (5.11) de las funciones envolventes, de manera que permanece inalterada. Además, bajo esta transformación, es

posible reescribir las soluciones (5.10a) y (5.10b) de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{n,m}^l &= \sum_{j=1}^M \hat{a}_{lj} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(ik_j a_z n) \\ &+ \sum_{j=1}^M \hat{b}_{lj} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(-ik_j a_z n),\end{aligned}\quad (5.12a)$$

válida para $(m, n) \in \text{I}$, y

$$\tilde{\psi}_{n,m}^l = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_l}} \exp\left(i \frac{2\pi l}{M} m\right) \exp(ik_l a_z n), \quad (5.12b)$$

que es válida en $(m, n) \in \text{III}$. Aquí hemos definido $\hat{b}_{lj} \equiv \sum_{s=1}^M \hat{t}_{ls}^{-1} \hat{r}_{sj}$ y $\hat{a}_{lj} \equiv \hat{t}_{lj}^{-1}$. Para cada canal l podemos escribir la ecuación transformada de (5.5) como

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi}_0^l \\ \tilde{\phi}_1^l \end{pmatrix} = \mathcal{T}^{(N)} \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_N^l \\ \tilde{\phi}_{N+1}^l \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Si ahora introducimos las siguientes definiciones

$$\begin{aligned}\mathcal{A}^0 &\equiv A_{jm}^0 = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right), \\ \mathcal{B}^0 &\equiv \mathcal{A}^0, \\ \mathcal{A}^1 &\equiv A_{jm}^1 = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(ik_j a_z), \\ \mathcal{B}^1 &\equiv B_{jm}^1 = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(-ik_j a_z), \\ \hat{a}^l &= \begin{pmatrix} \hat{a}_{l1} \\ \hat{a}_{l2} \\ \vdots \\ \hat{a}_{lM} \end{pmatrix}, \quad \hat{b}^l = \begin{pmatrix} \hat{b}_{l1} \\ \hat{b}_{l2} \\ \vdots \\ \hat{b}_{lM} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (5.14)$$

llegamos a la siguiente transformada de la ecuación (5.13) en términos

de los elementos de las matrices de *mezcla*

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi}_0^l \\ \tilde{\phi}_1^l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^0 & \mathcal{B}^0 \\ \mathcal{A}^1 & \mathcal{B}^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}^l \\ \hat{b}^l \end{pmatrix} = \mathcal{T}^{(N)} \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_{N-1}^l \\ \tilde{\phi}_N^l \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

y, finalmente, tenemos

$$\begin{pmatrix} \hat{a}^l \\ \hat{b}^l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^0 & \mathcal{B}^0 \\ \mathcal{A}^1 & \mathcal{B}^1 \end{pmatrix}^{-1} \mathcal{T}^{(N)} \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_{N-1}^l \\ \tilde{\phi}_N^l \end{pmatrix}, \quad (5.16)$$

que nos proporciona los elementos de matriz \hat{a}_{lj} y \hat{b}_{lj} con $j = 1, 2, \dots, M$ para cada canal l en términos del producto de dos matrices conocidas y de las soluciones transformadas (5.12b) en el contacto derecho para el canal l . Es importante señalar aquí que toda la información acerca del potencial de la heteroestructura está contenida en la matriz $\mathcal{T}^{(N)}$, de manera que ésta resulta ser la magnitud fundamental en la resolución del problema de dispersión.

5.2.1. Conductancia

Una vez que \hat{a} y \hat{b} han sido calculadas, obtener las matrices de *mezcla* \hat{r} y \hat{t} es sencillo. Sin embargo, las matrices calculadas de esta manera son matrices de *respuesta* del sistema que incluyen información sin contenido físico. Esta información espúrea proviene del hecho de haber estado considerando *todas* las soluciones matemáticas del problema de dispersión, incluidas las que divergen en infinito. Estas soluciones son aquellas para las que el momento en la ecuación (5.9) es una cantidad imaginaria. Para evitar estas soluciones espúreas desecharemos todos los elementos de \hat{t} para los que el número cuántico transversal l entrante y/o saliente satisfaga la siguiente condición

$$E < 2t_y \left(\cos \frac{2\pi l}{M} - 1 \right). \quad (5.17)$$

Una vez que son conocidas las matrices de *mezcla*, en particular la matriz \hat{t} , podemos utilizarlas para calcular distintas cantidades físicas como la conductancia o la corriente eléctrica. A partir del formalismo de Landauer-Büttiker [9, 13–15] es posible determinar la conductancia para un sistema de dos contactos y muchos canales a temperatura cero, usando para ello la fórmula de Fisher-Lee [11]

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t}). \quad (5.18)$$

5.2.2. Corriente eléctrica

Para poder calcular la corriente eléctrica debida a un campo aplicado F debemos modificar ligeramente nuestras ecuaciones y además son necesarias algunas aproximaciones adicionales. En primer lugar consideraremos contactos eléctricos perfectos, de manera que no haya caída de potencial en ellos. Además no tendremos en cuenta la contribución a la corriente de los electrones en el mar de Fermi del contacto derecho. Esta aproximación es buena siempre que $eV > E_F$, donde V es la caída de tensión a lo largo de la región II y E_F es el nivel de Fermi en el contacto izquierdo. Finalmente, haremos nuestro estudio a temperatura cero.

Cuando consideramos un campo eléctrico aplicado a lo largo de la dirección z , el potencial $U(y, z)$ en la ecuación (5.1) ha de ser reemplazado por $U(y, z) + U_F(z)$, donde U_F es constante en los contactos, ($U_F(z) = 0$ en la región I, y $U_F(z) = -eV$ en la región III) y se comporta linealmente en la región II, es decir, $U_F(z) = -eFz$. Aquí $V = FL$ es la caída de potencial a lo largo de la región II, cuya longitud es L . El momento electrónico en el contacto derecho ahora es

$$q_l = \frac{1}{a_z} \cos^{-1} \left\{ \frac{1}{2t_z} \left[E + eV - 2t_y \left(\cos \frac{2\pi l}{M} - 1 \right) \right] + 1 \right\}, \quad (5.19)$$

mientras que la nueva solución general en este mismo contacto es

$$\psi_{n,m}^l = \sum_{j=1}^M \hat{t}_{lj} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_j}} \exp\left(i \frac{2\pi j}{M} m\right) \exp(i q_j a_z n), \quad (5.20)$$

donde $(m, n) \in \text{III}$. Teniendo en cuenta todas las aproximaciones consideradas hasta ahora, es posible calcular una nueva matriz de transferencia $\mathcal{T}^{(N)}$ para cada valor de F . Insertando la solución (5.20) en la ecuación (5.16) podemos obtener ahora las matrices de *mezcla* para un determinado campo aplicado y, a partir de ellas, calcular la corriente eléctrica inducida por dicho campo. Partiendo de la expresión para la corriente de probabilidad podemos escribir una versión discreta de la contribución del canal l a la densidad de corriente electrónica a lo largo de la dirección del campo aplicado en el contacto derecho (calculada en una rodaja de índice n dentro de la región III, esto es, dentro de dicho contacto) como

$$j_z^l = i \frac{e t_z a_z}{\hbar a_y} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \text{Im}[(\psi_{n,m}^l)^* \psi_{n+1,m}^l]. \quad (5.21)$$

Para calcular la densidad total de corriente a través de la muestra simplemente necesitamos sumar sobre todos los estados transversales permitidos por debajo del nivel de Fermi en el contacto izquierdo, esto es

$$j_z = i \frac{e t_z a_z}{2\pi \hbar a_y} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^M \int_0^{k_F^l} \text{Im}[(\psi_{n,m}^l)^* \psi_{n+1,m}^l] dk. \quad (5.22)$$

Nótese que aquí el momento electrónico en la dirección z , k , varía de manera continua dado que la energía de un electrón incidente puede tomar cualquier valor comprendido entre 0 y E_F . En esta última expresión k_F^l es la componente del momento electrónico a lo largo de la dirección z de un electrón que incide con número cuántico transversal l y energía incidente E_F . Utilizando los elementos de la matriz de transmisión finalmente

llegamos a

$$\begin{aligned}
 j_z = & i \frac{et_z a_z}{2\pi \hbar a_y} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^M \int_0^{k_F^l} \sum_{j=1}^M \sum_{s=1}^M \hat{t}_{lj}^* \hat{t}_{ls} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_s \mathcal{N}_j}} \exp \left(i \frac{2\pi(s-j)m}{M} \right) \\
 & \times \exp(i(q_s - q_j)a_z n) [\exp(iq_s a_z) - \exp(-iq_j a_z)] dk. \quad (5.23)
 \end{aligned}$$

Los resultados que hemos obtenido proporcionan una descripción analítica exacta, aunque no cerrada, de cualquier heteroestructura bidimensional basada en semiconductores de gap ancho, siempre que el hamiltoniano de Ben Daniel-Duke resulte válido como aproximación. Además es importante señalar que la generalización a tres dimensiones es directa, aunque desde un punto de vista computacional las dificultades en este caso aumentan sensiblemente.

5.3. Dobles barreras con desorden en las intercaras

El efecto túnel resonante en heteroestructuras de doble barrera hace de estos sistemas candidatos muy prometedores para constituir una nueva generación de dispositivos electrónicos de alta velocidad. Por ejemplo, en la literatura se han descrito heteroestructuras de doble barrera fabricadas en GaAs-Al_xGa_{1-x}As funcionando a frecuencias del orden de los terahercios [112]. El origen del efecto túnel resonante en las heteroestructuras de doble barrera es un efecto cuántico cuyas características fundamentales son hoy en día bien conocidas: existe un incremento espectacular de la transmisión electrónica a través de la doble barrera cuando la energía de los electrones incidentes está próxima a alguno de los niveles cuasi ligados del pozo [113]. En la práctica, se aplica un voltaje con la finalidad de desplazar la energía del nivel cuasi ligado de manera que su centro se alinee con el nivel de Fermi. En consecuencia, la curva corriente-voltaje presenta resistencia diferencial negativa, dado que si seguimos aumentando el

potencial aplicado el nivel de Fermi estará por debajo de la resonancia de transmisión, y esta caerá abruptamente. Esta imagen extremadamente

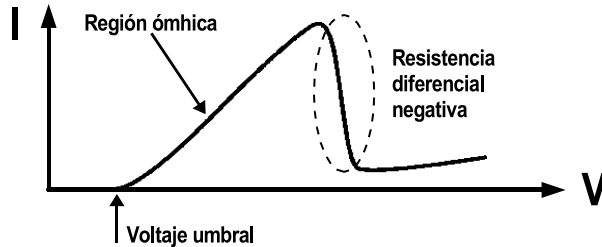


Figura 5.2. Región de resistencia diferencial negativa en la curva de corriente frente a voltaje obtenida en un dispositivo de doble barrera [26].

simple de los dispositivos basados en heteroestructuras de doble barrera contrasta con las dificultades encontradas para describir de forma apropiada las muestras reales de este tipo. Dispersión por fonones, electrones, o defectos reducen la coherencia cuántica necesaria, y de hecho, se observan desviaciones respecto a la descripción anterior. Estos mecanismos de dispersión pueden explicar la aparición de efectos como resonancias en bandas laterales debidos a la interacción con fonones [114, 115] y fotones [116, 117], histéresis en las curvas de corriente-voltaje debidas a efectos de interacción de muchos cuerpos [118–120], o la disminución de la movilidad electrónica debida a la rugosidad en las superficies, existente incluso en heteroestructuras de alta calidad cristalina [104].

En la siguiente sección vamos a tratar de estudiar los efectos que sobre las propiedades de transporte electrónico tiene la rugosidad presente en las intercaras entre los distintos semiconductores que aparece durante el proceso de crecimiento de heteroestructuras de doble barrera formadas por GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Esta rugosidad puede considerarse como desorden no intencional que, siguiendo a Mäder y col. puede clasificarse en dos categorías, lateral y vertical [61] (véase la figura 5.4). Este desorden

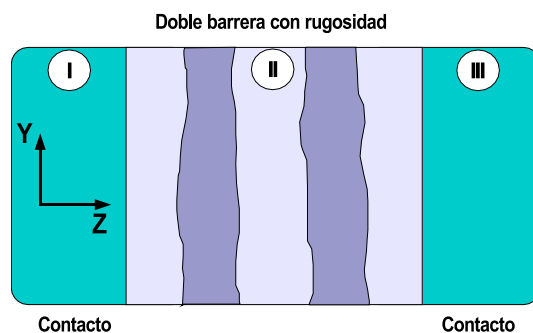


Figura 5.3. Vista esquemática de un dispositivo de doble barrera con rugosidad en la intercara entre distintos materiales.

no intencional depende críticamente de las condiciones de crecimiento (presiones parciales, temperatura, etc.) y puede ser caracterizado usando distintas técnicas, como la microscopía túnel de barrido [121–123] o la dispersión de rayos X [124]. Como ya dijimos, el desorden lateral aparece cuando un semiconductor se introduce en el otro, dando lugar a intercaras químicamente entremezcladas, escalones e islas. Como consecuencia de dicho desorden lateral, la intercara no es plana y se rompe la simetría translacional en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento. Por otro lado el desorden vertical se observa cuando el grosor de una lámina fluctúa en torno a su valor nominal. A continuación vamos a estudiar cómo afecta a la corriente y la conductancia la rugosidad presente en las intercaras de una doble barrera tanto en forma de desorden lateral como en forma de desorden composicional —el debido a fluctuaciones locales de la concentración de Al— que puede ser visto como una mezcla de desorden lateral y vertical.

5.3.1. Desorden lateral

Para tratar el desorden lateral hemos desarrollado un modelo de intercara en el que consideramos la formación de islas consecutivas las unas

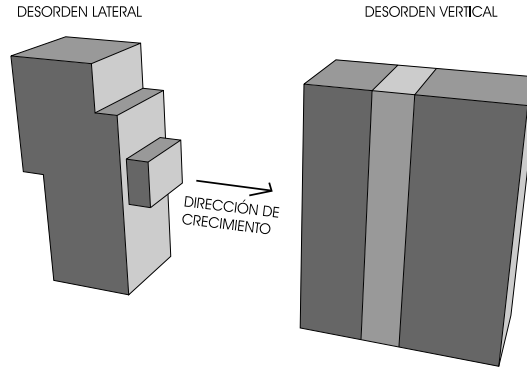


Figura 5.4. Esquema mostrando la diferencia entre desorden lateral y vertical.

a las otras, todas ellas con el mismo tamaño lateral. En este modelo las islas tienen alturas que están distribuidas estocásticamente (véase la figura 5.5). Es posible expresar el perfil de rugosidad de la intercara entre dos láminas consecutivas definiendo la siguiente función para la altura de la intercara en cada punto respecto a su valor nominal

$$h(y) = \eta \sum_n w_n \{ \theta(y - n\zeta) + \theta[(n+1)\zeta - y] - 1 \}. \quad (5.24)$$

Aquí $h(y)$ representa la desviación respecto a una superficie plana en la posición y , θ es la función theta de Heaviside, ζ es la anchura de las islas, w_n es la variable aleatoria asociada a la n -ésima isla que controla la fluctuación de la altura en torno al valor medio, y η es la desviación máxima —en valor absoluto— suponiendo que las variables w_n están uniformemente distribuidos entre -1 y 1 . De aquí en adelante nos referiremos a η como grado de desorden lateral.

Para simular el desorden lateral, vamos a considerar dos tipos de modelos. El primero de ellos es el que llamaremos desorden no correlacionado, para el cual las variables aleatorias w_n toman valores desde -1 a 1 con distribución uniforme, verificándose el correlador $\langle w_n w_m \rangle = \delta_{nm}/3$.

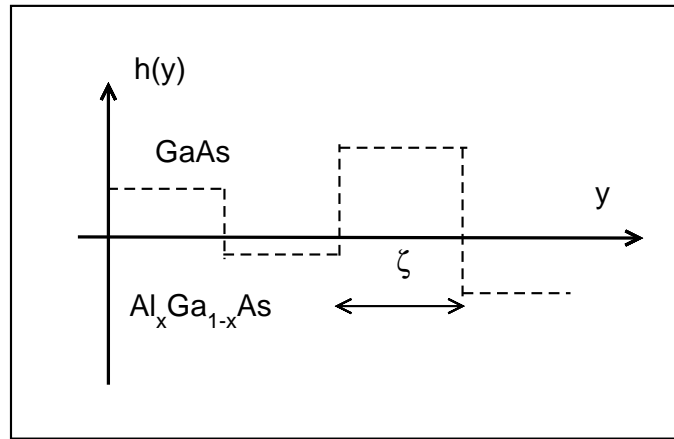


Figura 5.5. Islas y escalones modelando el desorden lateral (rugosidad) en la intercara entre dos capas de distintos materiales semiconductores.

Un correlador como este implica que la altura de la superficie en cada punto es independiente del valor de la altura en cualquier otro punto del resto de la intercara. Sin embargo, resultados experimentales y modelos teóricos de procesos de crecimiento por MBE [125] muestran que las alturas de la superficie en puntos distantes están fuertemente correlacionadas [126]. Para modelizar esta situación consideraremos un segundo modelo de desorden lateral en el que las variables aleatorias w_n siguen una distribución normal con valor medio cero y serán tales que satisfagan el siguiente correlador exponencial $\langle w_n w_m \rangle = \exp(-|n - m|/\xi)/3$, donde ξ es la longitud de correlación del desorden. En lo que sigue todos los resultados presentados han sido calculados a temperatura cero, salvo que se indique otra cosa.

Pasando ya a los resultados obtenidos con nuestro modelo para los distintos tipos de desorden lateral, comenzamos realizando algunos cálculos numéricos para estudiar el efecto que sobre la conductancia tienen distintos valores del grado de desorden η en el caso de desorden no corre-

lacionado. La figura 5.6 muestra la conductancia calculada para distintos valores de η . Aquí $a_y = 10$ nm, $a_z = 0,3$ nm, $\zeta = 20$ nm, $M = 50$, y $N = 38$. La anchura de las barreras es de 2,1 nm tanto para el emisor como para el colector, sus alturas son también idénticas e iguales a 0,3 eV, y la anchura del pozo es de 4,8 nm. Las curvas se corresponden con el

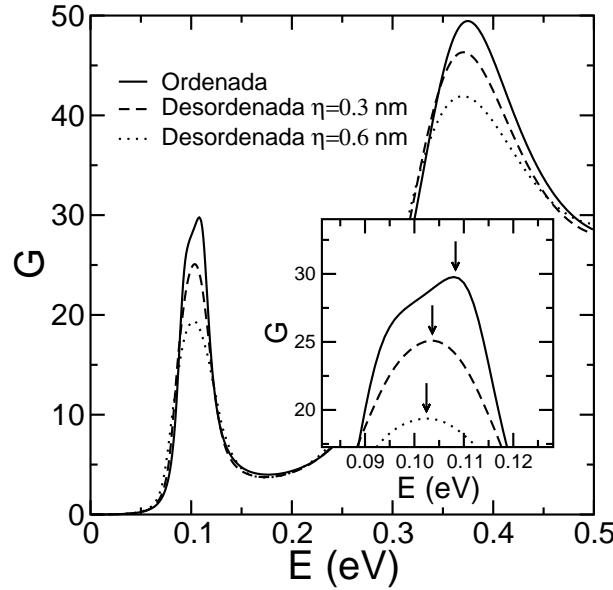


Figura 5.6. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ de una doble barrera ordenada, comparada con la de una desordenada para dos valores distintos del grado de desorden lateral η . Los resultados con desorden fueron obtenidos promediando sobre 100 realizaciones distintas del desorden lateral. En el recuadro interior se puede apreciar el desplazamiento de la primera resonancia de conductancia hacia energías menores a medida que crece el desorden lateral.

promedio calculado para un conjunto de curvas de conductancia calculadas sobre 100 realizaciones distintas del desorden lateral. Se estudiaron tres valores distintos del grado de desorden, $\eta = 0$ (doble barrera perfecta sin rugosidad en las intercaras), $\eta = 0,3$ nm (la mayor fluctuación es del orden de una monocapa) y $\eta = 0,6$ nm (la mayor fluctuación es del

orden de dos monocapas). Como resultado principal puede apreciarse en la figura 5.6 que al aumentar el grado de desorden η se produce una disminución del valor de la conductancia a la energía de la resonancia de la doble barrera. También es posible observar como el máximo de conductancia se ensancha ligeramente debido a las fluctuaciones en la energía del nivel resonante que se producen en cada realización del desorden. Es posible observar, además, un efecto adicional: a medida que el grado de desorden lateral aumenta, el máximo de conductancia se desplaza hacia menores energías. Este efecto será importante para explicar más adelante las curvas de corriente-voltaje.

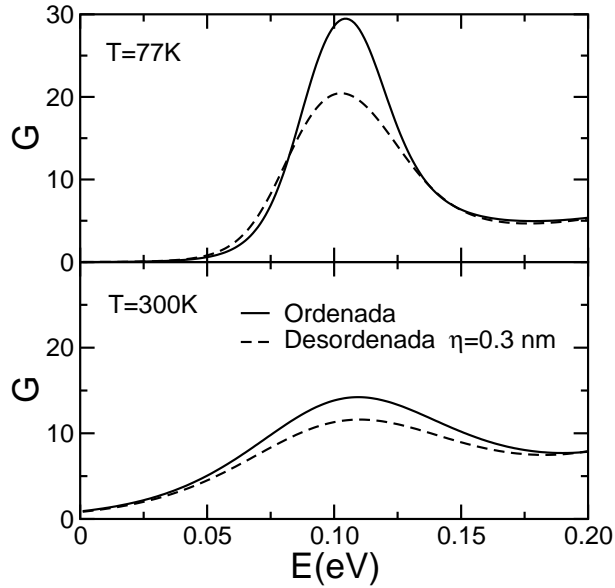


Figura 5.7. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ de una doble barrera ordenada comparada con la de una desordenada para dos valores distintos de la temperatura, $T = 77$ K y $T = 300$ K. Las curvas con desorden se obtuvieron promediando sobre 100 realizaciones. $\eta = 0,3$ nm en el caso desordenado.

Con la finalidad de comprobar cuál es el efecto de una temperatura

finita (distinta de cero) sobre la conductancia, hemos calculado esta cantidad a dos valores distintos de la temperatura, $T = 77$ K y $T = 300$ K, usando para ello la fórmula de Engquist-Anderson [12]. La figura 5.7 muestra la conductancia en el caso de un sistema ordenado y de uno desordenado en el que $\eta = 0,3$ nm. En ambos casos puede observarse como la curva de conductancia se ensancha a medida que la temperatura se incrementa, a la vez que su valor máximo disminuye. Se sigue observando una disminución en el valor de la conductancia como consecuencia de la presencia del desorden lateral.

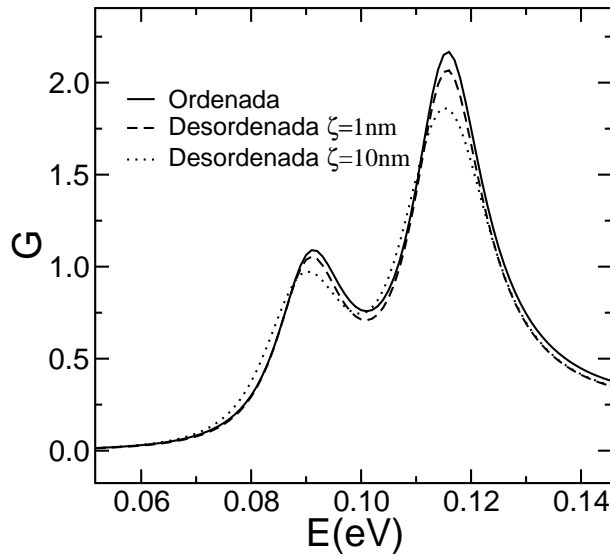


Figura 5.8. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ en función del tamaño de las islas para $\zeta \sim \lambda_e$ (línea de puntos) y $\zeta < \lambda_e$ (línea rayada). Las curvas fueron calculadas promediando sobre 50 realizaciones del desorden.

Pasando ahora al efecto del tamaño de las islas, ζ , hemos podido observar que es inexistente salvo cuando dicho tamaño es del orden de la longitud de onda de de Broglie del electrón, es decir, cuando $\zeta \gg \lambda_e$ la conductancia no depende de ζ . Como uno esperaría, cuando $\zeta \sim \lambda_e$

el electrón comienza a *ver* el desorden y la conductancia se incrementa a medida que ζ disminuye, como se observa en la figura 5.8. Para energías en torno a 0,1 eV la transición tiene lugar para tamaños $\zeta \sim 10$ nm.

La figura 5.9 nos muestra la corriente en función del campo aplicado. Para realizar este cálculo escogimos los siguientes parámetros:

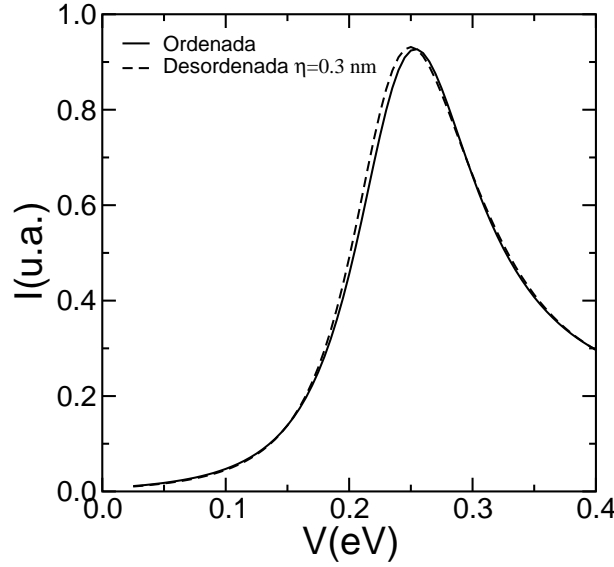


Figura 5.9. Corriente electrónica en unidades arbitrarias en función del voltaje aplicado a lo largo de la dirección z para una doble barrera ordenada y para otra desordenada. La curva fue calculada promediando sobre 50 realizaciones del desorden.

$a_y = 10$ nm, $a_z = 0,1$ nm, $\zeta = 10$ nm, $M = 20$ y $N = 77$. La anchura de las barreras es de 2,1 nm para ambas, al igual que su altura, que se tomó como 0,25 eV. La anchura del pozo es 2,9 nm. Las curvas mostradas en la figura 5.9 corresponden a un promedio sobre 50 realizaciones del desorden lateral. El nivel de Fermi se fijó en 20 meV, el voltaje máximo aplicado fue de 0,5 V, y el grado de desorden lateral escogido fue $\eta = 0,3$. Sorprendentemente, se encontró que la corriente en el sistema desordenado es mayor que aquella observada en el ordenado. Este resultado,

contrario a la intuición, puede explicarse recordando el desplazamiento a energías más bajas del pico de conductancia que hemos discutido anteriormente. Este desplazamiento puede entenderse suponiendo que la rugosidad superficial hace que la anchura efectiva del pozo cuántico sea mayor que su valor nominal. Esto implicaría una resonancia de transmisión a una energía más baja, de manera que el máximo de corriente se desplace también hacia voltajes más bajos. Sin embargo, un pozo de mayor anchura efectiva implica también una corriente mayor, de manera que, desde un punto de vista estadístico, la corriente para una doble barrera desordenada será mayor.

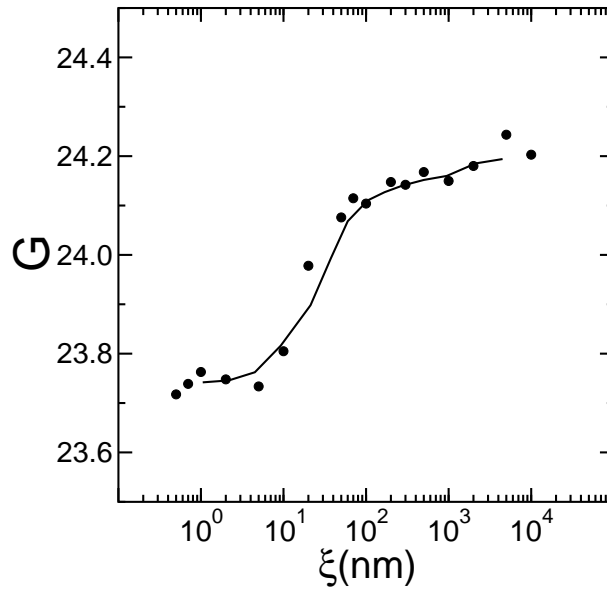


Figura 5.10. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ de una doble barrera desordenada en el caso en el que el desorden lateral es exponencialmente correlacionado, en función de la longitud de correlación, para un energía $E_c = 0,1025$ meV. Cada punto de la curva fue calculado promediando sobre 50 realizaciones de desorden correlacionado con un valor fijo de la longitud de correlación ξ .

Hasta ahora hemos considerado sólo desorden lateral no correlacionado en las heterouniones. Hemos calculado también la conductancia para una doble barrera en la que la rugosidad en las intercaras está exponencialmente correlacionada tal y como describimos previamente. La figura 5.10 muestra la conductancia a una cierta energía, $E_c = 0,1025$ eV, próxima a la de la resonancia para el caso ordenado (a energías próximas a la de resonancia las fluctuaciones son de menor amplitud), cuando la longitud de correlación varía varios órdenes de magnitud. Los parámetros físicos son los mismos que se escogieron para la figura 5.6. El tamaño de las islas es de 20 nm, mientras que el grado de desorden lateral es $\eta = 0,3$ nm. Para la obtención de la curva se promedió sobre 50 realizaciones del desorden lateral correlacionado. En la figura puede observarse como la conductancia incrementa a medida que incrementa la longitud de correlación. Se observan claramente dos regímenes asintóticos para longitudes de correlación pequeñas y grandes respectivamente. El primero de estos límites, $\xi \rightarrow 0$ puede extrapolarse al caso ya estudiado en el que el desorden lateral no es correlacionado. Un estudio más detallado de la figura 5.10 revela que este límite no correlacionado describe correctamente las propiedades de transporte del sistema siempre que la longitud de correlación no exceda los 10 nm. Así llegamos a la importante conclusión de que aquellos modelos de transporte electrónico en dobles barreras desordenadas basados en la suposición de que el desorden no es correlacionado proporcionan valores correctos para la conductancia incluso en algunos casos en los que la longitud de correlación es no nula (aunque no excesivamente grande). No es necesario decir que los modelos de desorden no correlacionado son mucho más convenientes desde un punto de vista analítico que aquellos en los que el desorden es correlacionado. El tamaño de la zona de la figura 5.10 en la que las correlaciones no juegan ningún papel esencial está determinado por el tamaño de las islas, ζ , como es de esperar. Esto es debido a que sólo correlaciones en el desorden cuya longitud de correlación sea mayor que el tamaño de las islas afectan

al movimiento electrónico. Para pequeños tamaños de isla —comparados con la longitud de correlación— la conductancia aumenta a medida que la longitud de correlación crece. Esta tendencia se observa hasta tamaños del orden de los 100 nm que son del orden del tamaño del sistema en la dirección y , observándose entonces la aparición de un nuevo régimen. En este régimen es posible calcular el valor límite de la conductancia como un promedio sobre distintas heteroestructuras de doble barrera ordenadas, cada una de ellas con una anchura aleatoria distribuida normalmente.

5.3.2. Desorden composicional

El desorden composicional en heteroestructuras fabricadas a partir de GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es debido a la ausencia de uniformidad espacial en la fracción molar de aluminio durante el proceso de crecimiento epitaxial de la heteroestructura. Nos proponemos simular el desorden composicional definiendo una malla espacial bidimensional sobre la región en la que se encuentran las barreras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ como mostramos en la figura 5.11. Hecho esto, asociaremos un valor x_{ij} para la fracción molar de Al a cada región de la malla etiquetada con el par de índices $\{ij\}$. Este valor fluctuará aleatoriamente en torno al valor nominal de la fracción molar de aluminio \bar{x} , en la barrera. De esta manera podemos escribir

$$x_{ij} = \bar{x} + \Omega w_{ij} \quad (5.25)$$

donde Ω es la fluctuación máxima de la fracción molar de Al, y w_{ij} es una variable aleatoria asociada al punto $\{ij\}$ de la malla, que toma valores entre -1 y 1 . Nótese que la fracción molar promediada sobre toda la malla tiene un valor aproximadamente igual a \bar{x} . Para poder estudiar el efecto del desorden composicional sobre el transporte electrónico y aislar dicho efecto de aquellos debidos a la presencia de rugosidad en las intercaras, supondremos que dichas intercaras son perfectamente planas y que las anchuras de las distintas láminas semiconductoras son iguales a sus

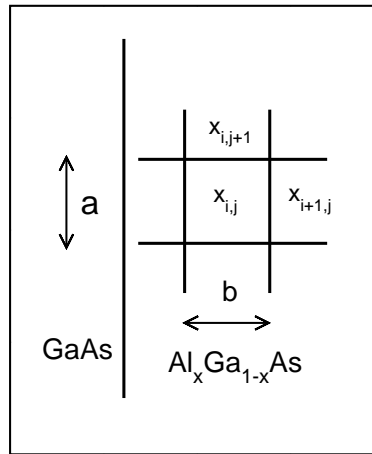


Figura 5.11. Esquema de la malla introducida en las barreras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ mostrando la distribución de concentraciones de Al en distintas posiciones.

respectivos valores nominales, es decir, despreciaremos cualquier fluctuación en el valor de dichas espesores. En la figura 5.12 pueden observarse resultados típicos para la conductancia en un sistema de doble barrera con desorden composicional en el que los parámetros estructurales son los mismos que en la figura 5.6. Las dimensiones de la región en la que asumimos que la fracción molar de Al permanece constante se escogieron como $a = 10 \text{ nm}$ y $b = 1 \text{ nm}$ (véase la figura 5.11). En los resultados puede observarse como para fluctuaciones tan grandes como $\Omega = 0,14$, esto es, para fluctuaciones del orden de $0,1 \text{ eV}$ en la altura de la barrera, cuando promediamos sobre 100 realizaciones, la conductancia prácticamente no cambia (las variaciones son del orden del 3%). Este comportamiento es consecuencia de que la densidad de probabilidad electrónica dentro de las barreras, allí donde consideramos el desorden composicional, es muy pequeña. En otras palabras, incluso inhomogeneidades espaciales moderadamente elevadas dejan la conductancia prácticamente inalterada. Por tanto, podemos concluir que los efectos del desorden composicional so-

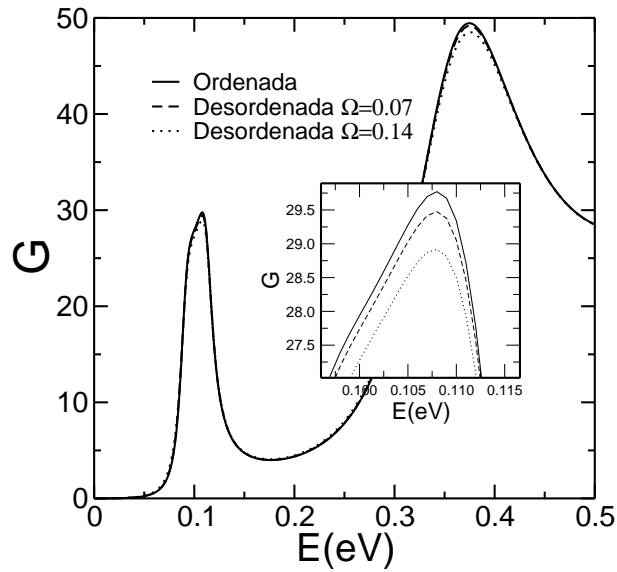


Figura 5.12. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ de una doble barrera ordenada, comparada con la misma magnitud de una doble barrera con desorden composicional para dos valores distintos de Ω . En el recuadro interior se muestra aumentada la zona próxima a la primera resonancia.

bre la conductancia pueden ser descartados frente a aquellos debidos al desorden lateral.

5.4. Puntos cuánticos autoensamblados

Recientes avances en nanotecnología han hecho posible el crecimiento de superredes de puntos cuánticos [127, 128]. A la vista de la analogía entre átomos y puntos cuánticos, cabe esperar que cuando dichos puntos cuánticos sean colocados con una distribución espacial periódica formando una matriz, como en el caso de una superred, tenga lugar la formación de una minibanda de estados electrónicos [132, 133] a causa de la superposición de funciones de onda electrónicas en puntos próximos

entre sí. Aunque esta analogía no puede ser llevada muy lejos debido a que los portadores en puntos cuánticos se ven influenciados por la presencia de fonones, defectos, estados superficiales, etc., es claro que los niveles de la minibanda dependerán sensiblemente de cómo es la distribución de posiciones en una matriz de puntos cuánticos. En este sentido las matrices de puntos cuánticos crecidas por MBE pueden tener distribuciones de posiciones totalmente aleatorias [129, 130], parcialmente ordenadas [127, 128], o bien perfectamente periódicas [131]. A continua-

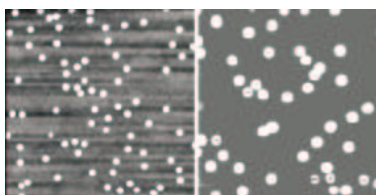


Figura 5.13. Imagen de microscopía de fuerzas mostrando islas de InAs (izquierda) e InGaAs (derecha) crecidas epitaxialmente sobre un sustrato de GaAs. Las islas, con forma de pirámide de unos 30-40 nm de base y 4-8 nm de altura, dan lugar a puntos cuánticos cuando son cubiertas por una capa epitaxial de GaAs [151].

ción nos proponemos caracterizar la formación de minibandas de estados electrónicos en superredes de puntos cuánticos, mediante de las propiedades de transporte electrónico en estos sistemas. También observaremos la destrucción de estas minibandas cuando desaparece la ordenación periódica de los puntos en estas heteroestructuras. Para ello tendremos en cuenta la destrucción del ordenamiento por la existencia de dos tipos de desorden, que denominaremos configuracional y morfológico.

5.4.1. Desorden configuracional y morfológico

Consideraremos en lo que sigue una matriz de 4×4 puntos cuánticos de GaAs en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (véase la figura 5.14) distribuidos irregularmen-

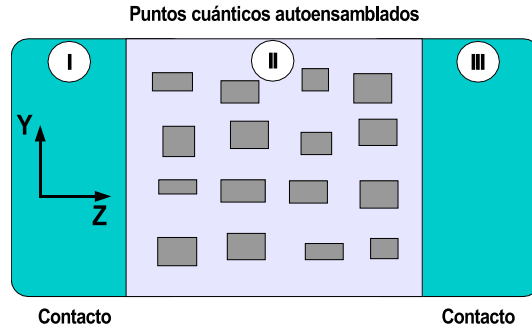


Figura 5.14. Vista esquemática de una matriz de puntos cuánticos mostrando desorden morfológico y configuracional.

te en una red (desorden configuracional), y cuyas formas son ligeramente distintas entre si (desorden morfológico). Para simular ambos tipos de desorden supondremos que los puntos se encuentran desplazados de su posición en una red regular en una cantidad vectorial aleatoria $\delta\mathbf{r}$, y que son de forma rectangular, variando el tamaño en la dirección de crecimiento en una cantidad $\delta\zeta$ respecto al valor nominal. Para evitar la profusión de parámetros libres en el modelo, consideraremos que la energía de confinamiento, dada por la discontinuidad entre las bandas de conducción de los semiconductores que componen la heteroestructura ΔE_c , es la misma para todos los puntos. Esto no es una limitación seria dado que las inhomogeneidades espaciales en la discontinuidad entre las bandas de conducción, y las fluctuaciones de la forma de los puntos, conducen esencialmente a los mismos resultados. En cualquier caso las modificaciones necesarias para tener en cuenta distintas energías de confinamiento ΔE_c son sencillas en nuestro esquema numérico.

Por una cuestión de claridad, separaremos en lo que sigue los efectos de desorden configuracional y morfológico. Como hemos anticipado, desorden configuracional significa que cada punto cuántico desplaza su posición $\delta\mathbf{r} = (\delta y, \delta z)$, mientras que su tamaño $d_y \times d_z$ y su forma permanecen

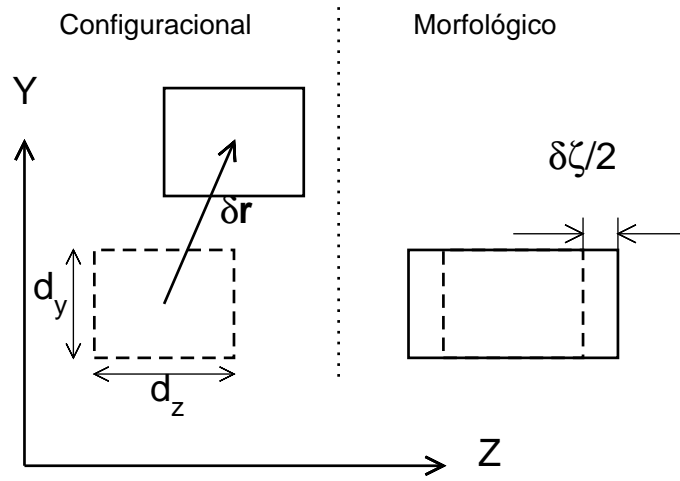


Figura 5.15. Modelos de desorden configuracional y morfológico. En el primero de ellos el punto cuántico desplaza su posición una cantidad $\delta \mathbf{r}$ mientras que su tamaño nominal $d_y \times d_z$ permanece inalterado. En el segundo la posición del centro del punto no cambia, mientras que su tamaño a lo largo del eje Z puede incrementarse o disminuirse en una cantidad $\delta\zeta$.

constante (véase la figura 5.15). Aquí δy y δz son variables aleatorias no correlacionadas con valor medio cero, y distribuidas uniformemente en los intervalos $[-W_y/2, W_y/2]$ y $[-W_z/2, W_z/2]$ respectivamente. En cuanto al desorden morfológico, consideraremos que cada punto se alarga a lo largo del eje Z una cantidad $\delta\zeta$, mientras que su centro permanece en su posición en la red regular (véase la figura 5.15), siendo $\delta\zeta$ una variable aleatoria distribuida uniformemente con anchura W_ζ .

5.4.2. Destrucción de la minibanda

Hemos realizado varios cálculos numéricos con el fin de estudiar el efecto tanto del desorden configuracional como del morfológico sobre la conductancia de superredes de puntos cuánticos fabricadas sobre GaAs

en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. La discontinuidad entre las bandas de conducción de estos materiales, ΔE_c , se tomó como el 70 % de la diferencia de sus intervalos de energía prohibida ΔE_g , que en heteroestructuras tensionadas de $\text{GaAs-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ tiene el valor $\Delta E_g = 1,45x$ eV. En adelante tomaremos $x = 0,35$ y, por tanto, $\Delta E_c = 0,35$ eV. Puesto que estamos principalmente interesados en los efectos del acoplo entre niveles a través del semiconductor de intervalo de energía prohibida más ancho, en lugar de en los niveles individuales confinados dentro de cada punto cuántico, tomaremos como valor para la masa efectiva en toda la heteroestructura el valor en GaAs, $m^* = 0,067m$, donde m es la masa del electrón libre. De cualquier manera, como ya se mencionó en el caso de la doble barrera de $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, nuestro modelo permite fácilmente ser generalizado para poder incluir una masa efectiva distinta en el interior de los puntos cuánticos. Las dimensiones de cada punto se eligieron como $d_y = 8,0$ nm y $d_z = 1,6$ nm, y la separación entre los centros de los puntos en la matriz ordenada como 14,0 nm y 6,8 nm en el eje Y y en el eje Z respectivamente. El número de puntos en la malla usada para el cálculo numérico fue $M = 50$ y $N + 1 = 39$.

Como resultado típico de nuestros cálculos, mostramos en la figura 5.16 la conductancia del sistema frente a la energía de Fermi, medida a partir del borde de la banda de conducción en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, en ausencia de campo eléctrico aplicado. La línea continua corresponde al resultado obtenido para la matriz periódica (ordenada). El acoplo entre los puntos cuánticos de la matriz da lugar a un desdoblamiento de cada nivel resonante asociado un estado ligado dentro de un punto cuántico, en tantos niveles como puntos contiene la matriz. Podemos observar en la figura 5.16 la aparición de dos minibandas por debajo de la energía de confinamiento en ausencia de desorden, lo que está de acuerdo con otros estudios previos [132]. Cada banda está caracterizada por cuatro máximos de conductancia, siendo cada uno de ellos la convolución de otros cuatro que no pueden ser resueltos excepto en el caso del que presenta menor energía en

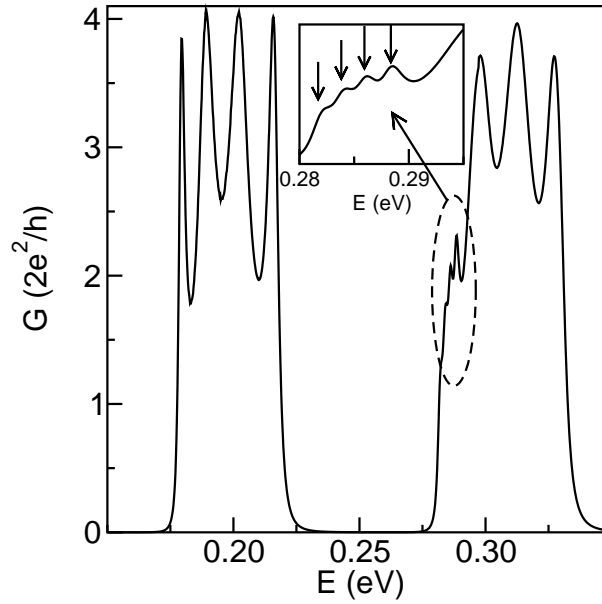


Figura 5.16. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ frente a la energía de Fermi para una matriz ordenada de 4×4 puntos cuánticos, en ausencia de campo eléctrico aplicado. El recuadro interior muestra un detalle del máximo de conductancia de más baja energía en la segunda minibanda.

la minibanda más alta (véase el recuadro de la figura 5.16). Estos cuatro picos se mezclan en uno único más ancho debido a la gran separación existente entre puntos cuánticos a lo largo de la dirección Y . Esta separación hace que el acoplamiento entre puntos cuánticos vecinos en el eje Y sea menor, es decir, $|t_y| < |t_z|$. De esta forma, el desdoblamiento de niveles debido al acoplamiento entre puntos vecinos en el eje Y es menor. El efecto de mezcla es mayor en la minibanda superior (véase el recuadro de la figura 5.16) debido a una mayor superposición de las funciones envolventes, lo que a su vez se manifiesta en un ensanchamiento de los cuatro picos principales.

El transporte a través de la minibanda cambia tan pronto como con-

sideramos cierto grado de desorden en la heteroestructura, como es de esperar. El tamaño medio y la separación entre puntos cuánticos, así como las fluctuaciones en torno a sus valores medios, dependen fuertemente de las condiciones de crecimiento (como, por ejemplo, la temperatura), así como de tratamientos térmicos posteriores [130]. Como muestra, la

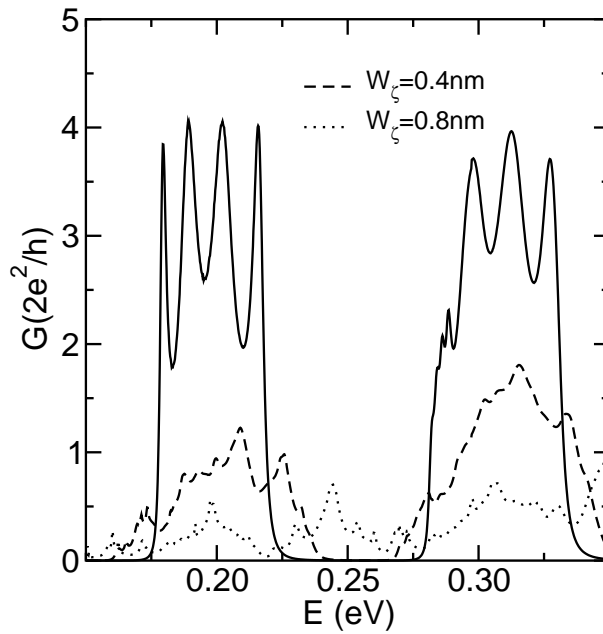


Figura 5.17. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ para una matriz de 4×4 puntos cuánticos con desorden morfológico: $W_\zeta = 0,4 \text{ nm}$ (línea de trazos) y $W_\zeta = 0,8 \text{ nm}$ (línea punteada). Estos resultados se comparan con los obtenidos para la conductancia en el caso de una matriz ordenada (línea continua).

figura 5.17 presenta la conductancia para dos valores distintos del grado de desorden en el caso de desorden morfológico; $W_\zeta = 0,4 \text{ nm}$ en un caso y $W_\zeta = 0,8 \text{ nm}$ en el otro. Por otro lado, la figura 5.18 muestra la conductancia calculada para dos valores distintos del grado de desorden en el caso de desorden configuracional; $W_z = 2,0 \text{ nm}$ es igual en los dos

casos, mientras que $W_y = 0$ nm en un caso y $W_y = 1,2$ nm en el otro.

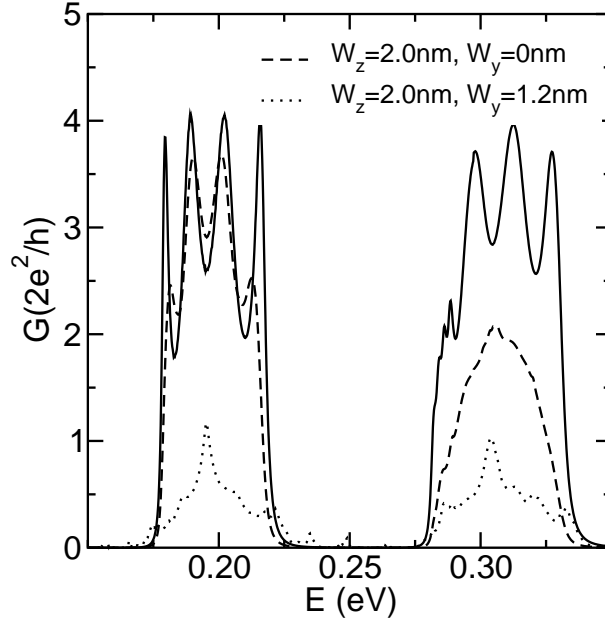


Figura 5.18. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ para una matriz de 4×4 puntos cuánticos con desorden configuracional: $W_y = 2,0$ nm y $W_z = 0$ nm (línea de trazos), y $W_y = 2,0$ nm y $W_z = 1,2$ nm (línea punteada). Estos resultados se comparan con los obtenidos para la conductancia en el caso de una matriz ordenada (línea continua).

Como principal resultado es importante señalar que los estados electrónicos en la matriz desordenada se comportan como los correspondientes a un material amorfo, en el sentido de que un incremento en el desorden supone una fuerte disminución en la conductancia, mientras que los intervalos de energías permitidas se ensanchan debido a las fluctuaciones de los niveles de energía de los puntos cuánticos para cada realización del desorden. Está claro a la vista de la figura 5.17 que el intervalo de energías prohibidas desaparece, en el caso de un grado de desorden morfológico muy elevado, a medida que el efecto túnel es menos probable debido a una gran separación entre los niveles de distintos

puntos cuánticos. Por otro lado, el efecto del desorden configuracional sobre la estructura de bandas es menos profundo, en el sentido de que el ensanchamiento es despreciable para valores realistas de los parámetros, aunque se sigue observando una disminución de la conductancia (véase la figura 5.18). Por otro lado, como es natural, se observa un máximo de conductancia para un valor de la energía igual a la del nivel individual de un único pozo.

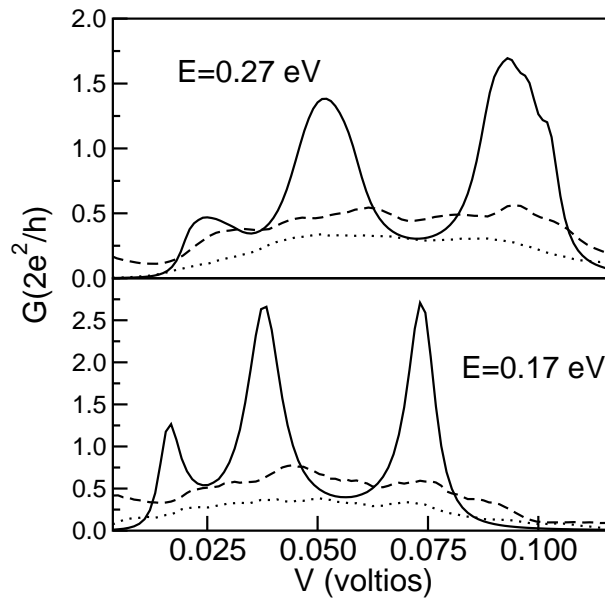


Figura 5.19. Conductancia en unidades de $2e^2/h$ para una matriz ordenada de 4×4 puntos cuánticos en función del voltaje aplicado (línea continua), cuando el nivel de Fermi es $E_F = 0,27\text{eV}$ (panel superior) y cuando el nivel de Fermi es $E_F = 0,17\text{eV}$ (panel inferior). Se compara este resultado con el obtenido para matrices 4×4 con desorden configuracional ($W_y = 2,0\text{ nm}$, $W_z = 1,2\text{ nm}$; línea a puntos), y morfológico ($W_\zeta = 0,8\text{ nm}$; línea a trazos).

En cuanto a los efectos de un campo eléctrico uniforme aplicado sobre la matriz de puntos cuánticos en la dirección z , hemos calculado la

conductancia para una energía de Fermi dada en función del voltaje aplicado V . Hemos considerado dos casos, $E_F = 0,17$ eV y $E_F = 0,27$ eV, que se corresponden, aproximadamente, con el fondo de las dos primeras minibandas. La razón de esta elección es observar el comportamiento de la conductancia cuando la minibanda baja y cruza el nivel de Fermi a medida que se incrementa el voltaje aplicado. Se consideró una caída uniforme de potencial a lo largo de la región II (figura 5.1). La figura 5.19 muestra la conductancia frente al voltaje aplicado, tanto para una superred de puntos cuánticos ordenada, como para superredes con desorden configuracional o morfológico. Las matrices ordenadas muestran tres regiones bien definidas de derivada dG/dV negativa debidas al efecto túnel resonante a través de los puntos cuánticos. Las tasas pico-valle observadas empeoran en el momento en que el desorden es tenido en consideración en el cálculo.

5.5. Conclusiones

Los principales resultados expuestos en este capítulo se pueden resumir en las siguientes conclusiones.

- Hemos desarrollado una herramienta teórica para el estudio de problemas de transporte electrónico en heteroestructuras semiconductoras con algún tipo de desorden o imperfección, en los que las aproximaciones analíticas clásicas no resultan apropiadas para su resolución.
- Esta nueva herramienta nos ha permitido estudiar el transporte electrónico en heteroestructuras de doble barrera de GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con desorden no intencional, así como el transporte en matrices bidimensionales (superredes) de puntos cuánticos de GaAs- $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ parcialmente ordenadas.

- En el caso de la doble barrera con desorden no intencional, hemos considerado dos tipos de desorden, lateral y composicional, debidos a la rugosidad en las intercaras y a la inhomogeneidad en la fracción de Al en las barreras, respectivamente.
- Hemos mostrado que el principal efecto del desorden lateral es una reducción de la conductancia. Cuando introducimos correlaciones en la rugosidad, la conductancia comienza a aumentar: cuanto mayor es la longitud de correlación, mayor es la conductancia. Además, de los resultados con rugosidad correlacionada se ha inferido que los modelos no correlacionados proporcionan valores correctos para la conductancia en el supuesto de que la longitud de correlación no exceda un cierto valor crítico. En cuanto a la corriente eléctrica, hemos observado un comportamiento sorprendente: ésta es mayor al considerar el desorden lateral que en el caso ordenado. Hemos atribuido este efecto a un desplazamiento en energías de la resonancia de transmisión en la doble barrera.
- Respecto al desorden composicional, hemos llegado a la conclusión de que pueden ignorarse, dado que sus efectos son mucho menores sobre el transporte que los debidos al desorden lateral.
- En el estudio de las matrices bidimensionales de puntos cuánticos, también consideramos dos tipos de desorden; morfológico y configuracional. El desorden morfológico es debido esencialmente a la dispersión en el tamaño de los puntos, mientras que el configuracional aparece por la disposición desordenada de los puntos respecto a la configuración ordenada en una red periódica bidimensional.
- En las matrices de puntos cuánticos se observó la formación de una minibanda de estados electrónicos la cual es destruida con la introducción del desorden que, a causa de la localización de Anderson

en las funciones envolventes, reduce el valor de la conductancia y ensancha la región de energías permitidas.

- Nuestros resultados sugieren que, de cara a la fabricación y crecimiento de matrices y superredes de puntos cuánticos, resulta más interesante poner énfasis en el control estructural de los puntos en sí, que sobre la disposición regular de estos en una red. Esto es debido a que, como hemos visto, el efecto del desorden morfológico sobre las propiedades de transporte es mucho más acusado que el efecto del desorden configuracional.
- Por último, la curva de conductancia frente a voltaje presenta varias regiones de dG/dV negativa, cuyas tasas pico valle decrecen fuertemente al introducir el desorden.

CAPÍTULO 6

Localización en heteroestructuras magnéticas

6.1. Introducción

Las más recientes técnicas litográficas han abierto el camino a la realización de experimentos con campos magnéticos no homogéneos en los que el tamaño de la región en la que cambia el campo magnético es del orden de los nanómetros [134]. La consecución de este tipo de campos magnéticos ha sido posible a partir de la fabricación de puntos magnéticos, deposición de materiales superconductores sobre heteroestructuras convencionales, o el crecimiento en patrones de ciertos materiales ferromagnéticos. El creciente interés en el estudio de gases de electrones bidimensionales (2DEG en adelante) sometido a campos magnéticos no homogéneos se debe principalmente a las especiales propiedades de transporte de las heteroestructuras magnéticas.

Podemos citar algunos ejemplos que muestran el interés del estudio del transporte en heteroestructuras magnéticas. En contraste con los fenómenos de transporte en régimen de efecto túnel a través de heteroes-

estructuras eléctricas, por ejemplo de tipo doble barrera, la probabilidad de túnel en heteroestructuras magnéticas depende no sólo de la componente del momento en la dirección normal a la barrera, sino también del momento en el plano de ésta. Este hecho convierte el transporte electrónico en régimen de efecto túnel, en un proceso inherentemente bidimensional en el que las barreras de tipo magnético poseen propiedades de filtro en el espacio de momentos [135]. El efecto de un campo magnético local sobre la corriente túnel a través de una barrera de potencial ancha considerado en la referencia [136] se ha relacionado con esta propiedad de filtrado. En esta misma referencia se ha mostrado que un campo magnético localizado estrictamente en el interior de la barrera de potencial conduce a resonancias localizadas *dentro* de la barrera.

Por otro lado, un gran número de artículos han tratado aspectos del transporte en un gas electrónico bidimensional (2DEG en adelante) en el seno de un campo magnético débilmente modulado [134, 137, 138]. Otro trabajo de interés en el área de los campos magnéticos espacialmente oscilantes es la medida de la magnetoresistencia en el régimen de campos pequeños observada en un 2DEG sometido a un campo magnético que alterna de signo de forma periódica [139].

Además de todo esto, el interés por el estudio del 2DEG en el seno de un campo magnético alternante está motivado por la relevancia de este problema en la descripción en términos del *fermión compuesto* de un nivel de Landau semi-lleno como análogo clásico del efecto Hall cuántico fraccional [140, 141]: como es sabido, en el caso de un 2DEG modulado en densidad, que se supone que se encuentra en régimen de efecto Hall cuántico fraccionario [142, 143], el problema del transporte se reduce al del movimiento en régimen balístico de fermiones compuestos en el seno de un campo magnético periódico. Un tratamiento semiclásico del problema conduce a considerar estados conocidos como *estados-serpiente* debido a la forma característica de las trayectorias en la analogía clásica. Müller, en la referencia [145], parece ser el primero en haber propuesto

un tratamiento mecano-cuántico de los *estados-serpiente* en un campo de gradiente constante. En presencia de un campo magnético constante se sabe que los electrones de un 2DEG idealmente no acotado se encuentran localizados en órbitas ciclotrónicas [146]. De esta forma, la conducción se hace cero en ausencia de dispersión por defectos o de límites en las muestras. Entre tanto, un campo magnético no uniforme puede dar como resultado un estado extendido en forma de *estado-serpiente*. Un estudio teórico detallado de los *estados-serpiente* puede encontrarse en [147], mientras que la confirmación experimental de su existencia y propagación a lo largo de líneas de campo magnético cero obtenida a partir de medidas del transporte se puede hallar en las referencias [134, 139].

La inusuales propiedades cinéticas y de túnel de las heteroestructuras magnéticas son consecuencia del reordenamiento del espectro energético debido a la presencia de un campo magnético no homogéneo. Hasta el momento, todos los trabajos teóricos dedicados al estudio del transporte electrónico en heteroestructuras magnéticas han utilizado modelos de una sola banda para describir el espectro energético. Esta aproximación es válida para semiconductores como el GaAs dado que en este caso, para campos magnéticos como los empleados normalmente en los experimentos, entre 0,1 y 1 T, el intervalo de energías prohibidas es mayor que la energía de ciclotrón. Esta situación, sin embargo, cambia en el caso de semiconductores con intervalo estrecho de energías prohibidas de tipo III-V, IV-VI y II-VI en donde un modelo de una única banda resulta inadecuado para la descripción de fenómenos de transporte electrónico.

En este capítulo pretendemos estudiar estructuras magnéticas en las que un semiconductor homogéneo de intervalo estrecho de energías prohibidas es sometido a un campo magnético no homogéneo [149]. Nuestra intención es proporcionar una descripción clara de los efectos de un campo magnético alternado sobre el espectro energético de un semiconductor de intervalo estrecho de energías prohibidas. En las estructuras magnéticas que consideraremos el campo magnético estará dirigido a lo largo del

eje Z , siendo homogéneo en la dirección del eje Y , y variando únicamente en la dirección del eje X . Como primera aproximación para el estudio del campo magnético no homogéneo, vamos a considerar una transición abrupta en forma de función escalón. La razón de esta aproximación es que, como ha sido mostrado en [135], con una elección adecuada de los parámetros experimentales, es posible hacer que la anchura de la región en la que se produce la variación del campo magnético sea menor que la longitud magnética característica l_H , que para valores del campo magnético de hasta 10 T no puede ser menor de 10 nm.

En este capítulo estudiaremos dos tipos de uniones magnéticas. Por un lado consideraremos las llamadas uniones magnéticas *invertidas* en las que $B_+B_- < 0$, donde $B_{\pm} \equiv B_z(x = \pm\infty)$. Por otro lado estudiaremos las denominadas uniones magnéticas *normales*, en las que $B_+B_- > 0$ (véase la figura 6.1).

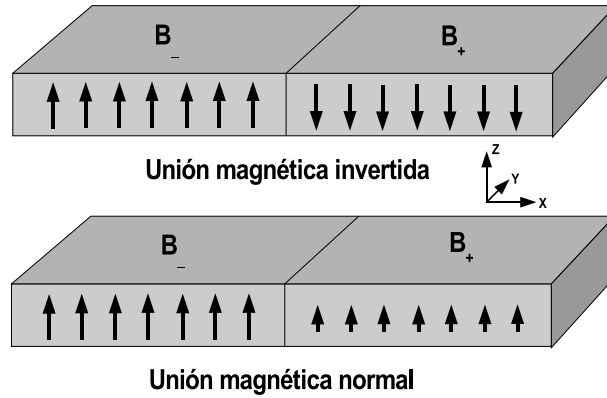


Figura 6.1. Dibujo esquemático que muestra una unión magnética invertida y una unión magnética normal.

6.2. Modelo de dos bandas

La forma más sencilla de tratar teóricamente los semiconductores de intervalo estrecho de energías prohibidas es mediante lo que se conoce como modelo de dos bandas [148] (véase la sección 2.1.3). La aproximación perturbativa a primer orden de la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ nos conduce al siguiente hamiltoniano de Dirac

$$H_0 = \begin{pmatrix} \Delta + V & -i\hbar v (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) \\ i\hbar v (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) & -\Delta + V \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

siendo Δ la semianchura del intervalo de energías prohibidas, $\Delta = E_g/2$, V la llamada función de trabajo, que describe el desplazamiento del centro del intervalo de energías prohibidas, \mathbf{k} es el operador momento $\mathbf{k} = -i\nabla$, v es el elemento de matriz inter-banda del operador velocidad, y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector cuyas componentes son las matrices de Pauli. En su forma más simple el hamiltoniano de Dirac del modelo de dos bandas trata los estados de los portadores en las bandas de valencia y de conducción, como dos estados de Kramers conjugados. De esta forma el hamiltoniano en la ecuación (6.1) tiene en consideración las propiedades de espín de las funciones de onda, que en este caso se denominan espinores.

En lo que sigue vamos a prescindir del término que da cuenta de la corrección Zeeman a la energía en presencia de un campo magnético. Así, es posible incorporar un campo magnético estático en \mathcal{H}_0 mediante la siguiente transformación de aforo

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (6.2)$$

Para un campo magnético $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ el potencial vector \mathbf{A} es, con la elección de aforo de Landau, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (0, xB_z, 0)$. Siguiendo la referencia [150], podemos escribir las autofunciones del hamiltoniano (6.1) para

el material masivo en la forma

$$\Psi^\pm(\mathbf{r}) = e^{i(k_y y + \chi_\zeta \zeta)} \begin{pmatrix} c_1 D_{p-1}(\pm\xi)\mathbf{u} + c_2 D_p(\pm\xi)\mathbf{v} \\ c_3 D_{p-1}(\pm\xi)\mathbf{u} + c_4 D_p(\pm\xi)\mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

donde los vectores \mathbf{u} y \mathbf{v} se definen de la forma

$$\mathbf{u} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \varphi \\ 1 - \varphi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \varphi \\ 1 + \varphi \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Aquí hemos definido la siguiente variable espacial adimensionalizada $\xi = \sqrt{2}(x_0 + x)/l_H$, donde $x_0 = \varphi k_y l_H^2$ es el centro de las orbitas de Landau, $\varphi = \text{sgn}(B_z) = \pm 1$ define la orientación del campo magnético ($\varphi = 1$ corresponde a un vector de campo apuntando en la dirección del eje Z positivo) y $l_H = \sqrt{\hbar c / |e B_z|}$ es la longitud magnética característica. Por último $\chi_\zeta = l_H k_z$, y $\zeta = z/l_H$ son la componente z del momento y la coordenada espacial en el eje Z adimensionales, respectivamente. Las funciones $D_p(\pm\xi)$ son las funciones especiales parabólicas cilíndricas, que constituyen dos soluciones independientes de la ecuación diferencial del oscilador armónico [144]

$$\left[-\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\xi^2}{4} \right] D_p(\xi) = \left(p + \frac{1}{2} \right) D_p(\xi), \quad (6.5)$$

siendo la relación de dispersión correspondiente al material masivo

$$\chi_\zeta^2 + 2p = \left[\frac{l_H}{\hbar v} \right]^2 [(E - V)^2 - \Delta^2], \quad (6.6)$$

donde P se determina a partir de las condiciones de contorno.

Los coeficientes espinoriales de la ecuación (6.3) vienen dados por

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{1}{\sqrt{p}} \end{pmatrix} \\ \frac{i\hbar v}{E - V + \Delta} (\mathbf{k}_p^\pm \cdot \boldsymbol{\sigma}) \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{1}{\sqrt{p}} \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

donde hemos definido $\mathbf{k}_p^\pm = 1/l_H(\pm i(1-p)/\sqrt{2}, \pm 1 + p/\sqrt{2}, \varphi\chi_\zeta)$.

Partiendo la ecuación de tipo Schrödinger determinada por el hamiltoniano (6.1) con la sustitución (6.2), pretendemos buscar una solución que sea combinación lineal de las autofunciones (6.3). En el caso de una unión magnética con un cambio abrupto (en forma de función paso) del campo magnético en $x = 0$, es necesario aplicar ciertas condiciones de contorno al problema. Estas se reducen a exigir la continuidad de la función de onda en la región en la que el campo magnético cambia de forma abrupta. Además deberemos considerar que las dos soluciones $D_p(\pm\xi)$ presentan distintos comportamientos asintóticos cuando $\xi(x) \rightarrow \pm\infty$. Dado que las soluciones deben decaer a cero lejos de la discontinuidad magnética, las funciones de onda sólo pueden incluir autofunciones de la forma Ψ^+ para $x > 0$, mientras que sólo autofunciones de la forma Ψ^- serán aceptables para $x < 0$.

6.3. Uniones magnéticas invertidas

En el caso de la unión magnética invertida, consideraremos la situación en la que se verifica $B_+ = -B_- = B$ (unión invertida simétrica), de manera que, tras un largo cálculo algebraico (ver apéndice A) llegamos a la siguiente expresión para la relación de dispersión

$$D_p^2(\xi_0) - pD_{p-1}^2(\xi_0) = 0, \quad (6.8)$$

donde $\xi_0 = \sqrt{2}k_y l_H$ es la coordenada x adimensional del centro de las orbitas de Landau. Esta ecuación define, para cada energía, los valores permitidos de la componente k_y del momento electrónico, que están relacionadas con la posición de los centros de las órbitas de Landau. En la

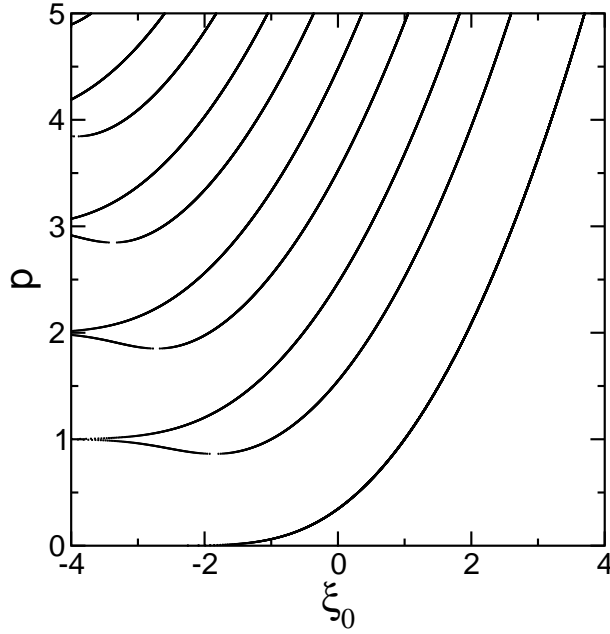


Figura 6.2. Espectro de energía de la unión magnética invertida simétrica.

figura 6.2 se presenta la solución numérica de la relación de dispersión de la ecuación (6.8), representándose los valores permitidos de p en función de ξ_0 . Considerando la dependencia de E con p que aparece en la ecuación (6.6), parece claro que podemos entender esta figura como el espectro energético del sistema.

Vamos a particularizar nuestro estudio al caso de un campo magnético semiclassical, en el que la energía cinética de un electrón puede escribirse como $E = 1/2m^*v^2$. Entonces la energía de Fermi es $\varepsilon_F = 4\hbar\omega_H$ siendo ω_H la frecuencia de ciclotrón. En lo que sigue Utilizaremos para nuestros

cálculos el siguiente valor para la energía de Fermi $\varepsilon_F = \Delta = 0,1$ eV. En el caso de un 2DEG (esto es, cuando $\chi_\zeta = 0$), la ecuación (6.6) implica que $(E - V)/\Delta = \sqrt{p + 1}$. En la figura se puede observar cómo el espectro de energía de la unión magnética invertida consiste en un conjunto de bandas sucesivas, que son los remanentes de los niveles de Landau, mostrando una rotura de la simetría de inversión temporal [145]. El espectro de energía que mostramos en la figura 6.2 tiene una analogía directa con el obtenido en el caso del modelo de una sola banda [147] y puede ser interpretado de la misma forma. En el caso de un 2DEG sometido a un campo magnético en forma de función paso el problema de una sola banda se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional

$$\left[\frac{1}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} - V_{k_y}(x) + E \right] \psi(x) = 0$$

con el potencial efectivo

$$V_{k_y}(x) = \left\{ k_y - x \left[1 - \left(1 - \frac{B_+}{B_-} \right) \theta(x) \right] \right\}^2,$$

que depende de k_y . En esta última expresión $\theta(x)$ es la función theta de Heaviside. Podemos analizar el espectro de energía de la unión magnética invertida en términos del potencial efectivo V_{k_y} . Para $k_y \ll 0$ el potencial tiene la forma de dos pozos parabólicos desacoplados. Para cada uno de ellos se obtienen como solución los niveles de Landau $(n + 1/2)\hbar\omega_H$; estos niveles de Landau son doblemente degenerados debido a que los estados son iguales en los dos pozos desacoplados, y su velocidad es $v_y = (\partial E_{n,k_y}/\partial k_y)(1/\hbar) = 0$ a lo largo del eje y . A medida que aumentamos k_y los dos pozos parabólicos comienzan a acoplarse. Como resultado la función de onda comienza a localizarse cerca de la región en la que el campo magnético varía. Estos estados localizados se caracterizan por una velocidad v_y distinta de cero que aumenta con el momento k_y , y por tener orbitas que penetran alternativamente en las regiones con campos

B_+ y B_- (*estados-serpiente*).

Como ya anticipamos, no estamos teniendo en consideración el efecto Zeeman en nuestros cálculos. Así, cada nivel de Landau se encuentra doblemente degenerado y es descrito mediante dos funciones de onda. El módulo cuadrado de una de las funciones de onda normalizadas a ambos lados de la región donde tiene lugar de discontinuidad del campo se escribe como sigue

$$|\Psi^\pm|^2 = \frac{1}{\sqrt{2}l_H I} \left\{ 1/p D_p^2(\pm\xi) + D_{p-1}^2(\pm\xi) \mp \frac{\Delta}{E - V} [D_{p-1}^2(\pm\xi) - 1/p D_p^2(\pm\xi)] \right\}. \quad (6.9)$$

donde $\Psi^+ = \Psi(x > 0)$, $\Psi^- = \Psi(x < 0)$, $\pm\xi = (\sqrt{2}/l_H)(x_0 \pm x)$, y

$$I = \int_{\xi_0}^{\infty} [D_{p-1}^2(y) + D_p^2(y)] dy.$$

La expresión analítica para la función de densidad de probabilidad del estado de espín conjugado de éste, $\tilde{\Psi}$, se escribe igual que (6.9) pero con un cambio de signo en el segundo término de esta ecuación.

En la figura 6.3 mostramos las funciones de densidad de probabilidad para los cuatro primeros cuasi-niveles de Landau en $\xi_0 = -2, 0, 2$. En ella las funciones de densidad de probabilidad de los distintos niveles han sido desplazadas hacia arriba unas respecto a las otras, correspondiendo la inferior al estado de menor energía empezando por la de menor energía (la inferior). En la figura puede observarse como el valor de ξ_0 determina no sólo la posición de los centros de las órbitas ciclotrónicas sino también la extensión de los cuasi-niveles de Landau. Cuanto mayor es el valor de ξ_0 más localizada se encuentra la función de onda. Como se observa en la figura 6.3(a), en $\xi_0 = -2$, cuando los electrones experimentan un potencial de doble pozo efectivo, la función de onda para los estados excitados es asimétrica. Sin embargo, cuando $\xi_0 = 0$ y $\xi_0 = 2$ (figuras

6.3(b) y 6.3(c) respectivamente) los electrones experimentan un potencial efectivo acoplado simétrico, de manera que la función de onda se hace simétrica.

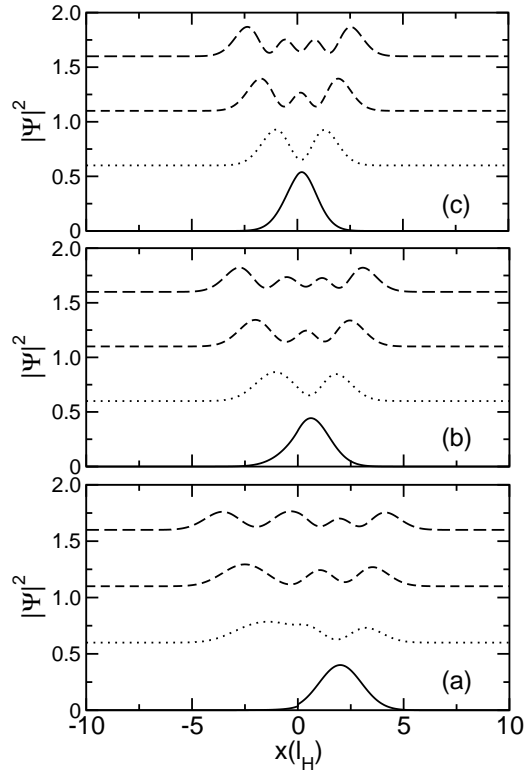


Figura 6.3. Funciones de onda de la unión magnética simétrica invertida para los cuatro niveles de Landau de menor energía en los puntos (a) $\xi_0 = -2$, (b) $\xi_0 = 0$, y (c) $\xi_0 = 2$.

6.4. Uniones magnéticas normales

En el caso de la unión magnética normal, el campo magnético simplemente cambia en valor absoluto en la región de transición que, al igual que en el caso de la unión magnética invertida, supondremos que es

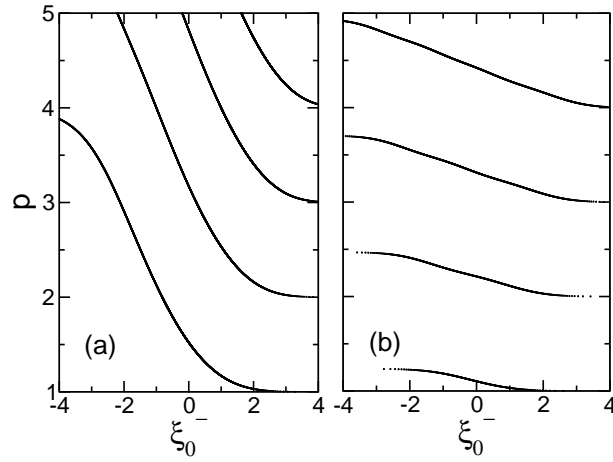


Figura 6.4. Espectro de energías de la unión magnética normal para (a) $\beta = 0,5$ y (b) $\beta = 0,9$.

abrupta. En este caso obtenemos la siguiente relación de dispersión (ver apéndice A)

$$l_H^- D_{q-1}(-\xi_0^-) D_p(\xi_0^+) + l_H^+ D_q(-\xi_0^-) D_{p-1}(\xi_0^+) = 0. \quad (6.10)$$

Aquí l_H^+ y l_H^- son los valores de la longitud magnética para $x > 0$ y $x < 0$, respectivamente, $\sqrt{q/p} = l_H^+/l_H^-$, y $\xi_0^\pm = \sqrt{2}k_y l_H^\pm$ son de nuevo las coordenadas x adimensionales de los centros de las órbitas de Landau a cada lado de la unión normal. En la figura 6.4 mostramos la solución numérica a la ecuación (6.10). Los cálculos se realizaron para dos valores distintos del parámetro $\beta = l_H^+/l_H^-$, $\beta = 0,5$ y $\beta = 0,9$. El espectro energético es ahora cualitativamente distinto al obtenido para la unión magnética invertida. En primer lugar, puede apreciarse que los estados dejan de ser degenerados para $k_y \ll 0$ (aunque siguen siendo doblemente degenerados en lo referente al espín). En segundo lugar, para $k_y \gg 0$ los niveles de energía se aproximan a los valores de Landau en el caso de un campo magnético uniforme. Por último, la velocidad electrónica

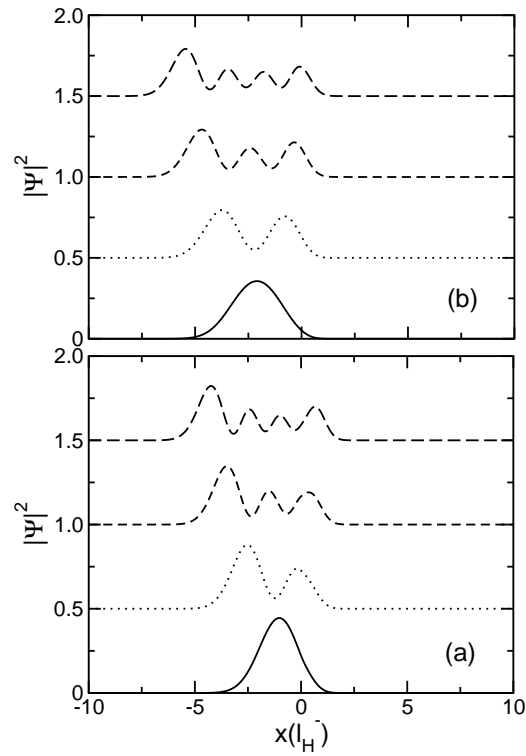


Figura 6.5. Función de onda de la unión magnética normal para $\beta = 0,5$ en los puntos (a) $\xi_0 = 0$ y (b) $\xi_0 = 2$.

a lo largo del eje Y o, lo que es lo mismo, la pendiente de las curvas de dispersión, depende del valor de β . Cuanto mayor es β , menor es la velocidad electrónica. Cuando $\beta \rightarrow 1$ la velocidad electrónica se anula y, en consecuencia, los *estados-serpiente* desaparecen.

De nuevo es posible analizar el espectro en términos del potencial efectivo. La velocidad de las órbitas electrónicas se reduce y tiende a cero tanto en el caso $k_y \ll 0$ como en el caso en que $k_y \gg 0$ en todos los cuasi-niveles de Landau. La figura 6.5 muestra la función de densidad de probabilidad para dos estados con $\xi_0 = 2$ (a) y $\xi_0 = 0$ (b) en el caso en que $\beta = 0,6$. Podemos observar el resultado esperado pues en ambos casos

los electrones se encuentran en estados localizados cerca de la región de discontinuidad del campo magnético, estando más localizados en $\xi_0 = 0$ que en $\xi_0 = 2$.

6.5. Espín

Podemos encontrar a partir del modelo de dos bandas que hemos utilizado, en el que las propiedades de espín están directamente caracterizadas por los autoestados, el valor medio del vector de espín a partir de la siguiente expresión

$$\langle \mathbf{S}(x) \rangle = \langle \Psi | \boldsymbol{\Sigma} | \Psi \rangle, \quad (6.11)$$

donde $\boldsymbol{\Sigma}$ es el operador de espín. Tras el cálculo llegamos a la conclusión de que el valor medio de ninguna de las tres componentes del vector de espín para cada valor de k_y se anula, ni siquiera en el caso de la unión magnética invertida simétrica. Por supuesto, la dirección de estos vectores para cada uno de los dos estados espín conjugados es opuesta a la del otro. En el caso de un 2DEG (es decir, cuando $\chi_\zeta = 0$) en una unión magnética invertida, se obtiene

$$\langle \mathbf{S}(x) \rangle = (0, 0, S_z(\xi))$$

donde

$$S_z^\pm(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}l_H I} \left\{ \mp (1/p D_p^2(\pm\xi) - D_{p-1}^2(\pm\xi)) - \frac{\Delta}{E - V} [D_{p-1}^2(\pm\xi) + 1/p D_p^2(\pm\xi)] \right\}.$$

Tras integrar a lo largo del eje x tenemos que

$$\langle S_z \rangle = -\frac{\Delta}{E - V}. \quad (6.12)$$

De esta expresión se sigue que, a pesar de que en la unión magnética invertida el número de electrones con espines opuestos es el mismo, el espín de cada uno de los estados de espín conjugados promediado a lo

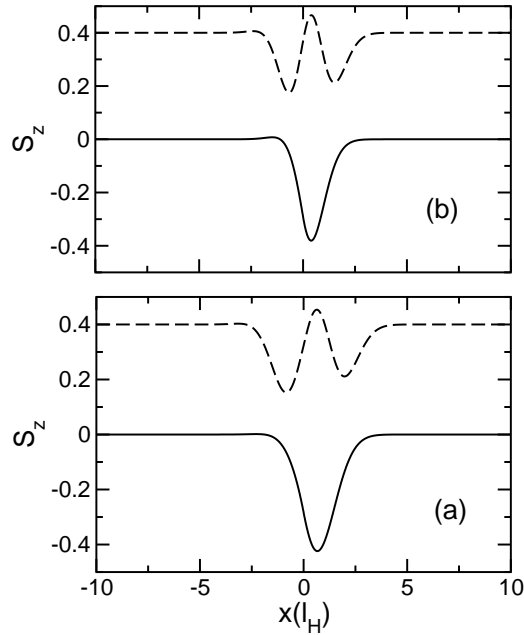


Figura 6.6. Valor medio del espín de la unión magnética invertida en función de x en los puntos (a) ξ_0 y (b) $\xi_0 = 2$.

largo del eje X resulta tener una componente distinta de cero. Es más, el valor absoluto de esta componente depende del valor de ξ_0 . En la figura 6.6 mostramos la componente z del espín en función de x en una unión magnética invertida para $\xi_0 = 0$ y $\xi_0 = 2$. Como se puede observar en esta figura el espín de los estados electrónicos localizados (los *estados-sepiante*) es una función de la posición localizada cerca de la región en la que el campo magnético cambia de forma abrupta. Obviamente, el otro estado de espín conjugado $\tilde{\Psi}$ tiene dirección opuesta, de manera que la suma total del espín es cero. En la figura 6.7 aparece el valor promediado a lo largo del eje x de la componente z del espín en función

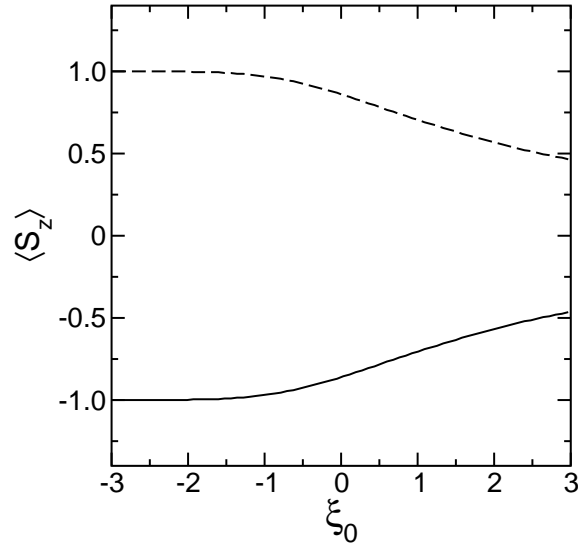


Figura 6.7. Espín promediado a lo largo del eje x de la unión magnética invertida en función de ξ_0 para Ψ (curva inferior) y $\tilde{\Psi}$ (curva superior).

de ξ_0 para los dos estados de espín conjugados correspondiente al primer cuasi-nivel de Landau. Es importante señalar que el espín promedio en el caso de estados deslocalizados (es decir, cuando $k_y \ll 0$) tiende a ± 1 para los dos estados degenerados y decrece lentamente hasta casi anularse para los estados localizados (con $k_y \gg 0$). Cuando se incluye el término Zeeman la degeneración de espín desaparece. Como resultado, cada cuasi-nivel de Landau de la unión magnética estará caracterizado por un valor no nulo del valor medio del espín, estando este localizado cerca de la discontinuidad en el campo en el caso de los *estados-serpiente*.

6.6. Conclusiones

A continuación resumimos los principales resultados presentados en este capítulo.

- En este capítulo hemos estudiado el espectro de energía de uniones magnéticas basadas en semiconductores de intervalo estrecho de energías prohibidas. Para ello hemos usado un modelo de dos bandas basado en un hamiltoniano de Dirac.
- Hemos mostrado como los niveles de Landau, en el caso de las uniones magnéticas, son sustituidos por bandas de cuasi-niveles de Landau degenerados. Además hemos interpretado el espectro de energías de las uniones magnéticas en términos de la forma de un potencial efectivo en un modelo de una banda.
- En la unión magnética invertida simétrica las velocidades electrónicas crecen con el momento k_y en la dirección en la que cambia el valor del campo, implicando esto un incremento de la conductividad en esta dirección. Mientras, en la unión magnética normal, la velocidad depende del cociente l_H^+/l_H^- , siendo cero en los límites $k_y \rightarrow \pm\infty$.
- El valor medio del vector de espín para los cuasi-niveles de Landau es distinto de cero. La componente z de este vector es una función de x localizada en la región en la que el campo cambia de valor. De esta forma podemos considerar los *estados serpiente*, para los que $k_y \ll 0$, como sistemas de espín cuasi-unidimensionales.

CAPÍTULO 7

Conclusiones

En este último capítulo vamos a resaltar los principales resultados encontrados a lo largo de este trabajo, su relevancia en el contexto de la Física de los Semiconductores y su proyección de futuro.

A lo largo del primer capítulo hemos estudiado el transporte electrónico en un nuevo tipo de heteroestructura con modulación de composición, las denominadas superredes gaussianas (SRGs), fabricadas a partir de $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, en las que la fracción de Al en las barreras es una función gaussiana de la posición. La principal conclusión de este capítulo ha sido que estas SRs constituyen una interesante opción en el diseño de filtros electrónicos de pasa banda en energías, con aplicaciones, por ejemplo, en la construcción de láseres de cascada. Desde un punto de vista del transporte electrónico hemos comprobado cómo las SRGs presentan una banda plana de conducción donde las SRs normales presentan un comportamiento oscilatorio. Nuestros cálculos además han mostrado cómo esta interesante propiedad es robusta frente a la aparición de desorden en forma de rugosidad en las intercaras de los distintos semiconductores que forman la heteroestructura. Para verificar si nuestras predicciones teóricas eran acertadas en lo referente a las SRGs, los grupos del Dr.

R. Hey del Paul Drude Institut für Festkörperelektronik (Berlín) y del Dr. Vittorio Bellani del Dipartimento di Fisica 'A. Volta' (Università di Pavia) se encargaron de crecer y caracterizar ópticamente, respectivamente, varias SRs como las estudiadas teóricamente en este trabajo. Los resultados han sido óptimos, en el sentido de que hemos sido capaces de reproducir mediante un cálculo de estructura electrónica, en el que se han tenido en cuenta efectos no lineales de interacción electrón-electrón, la posición del máximo de PL observado en los experimentos. En esta línea, esperamos en el futuro disponer de datos experimentales de medidas de transporte vertical en las muestras de SRGs para poder cotejar con nuestros resultados teóricos.

También hemos tratado en este trabajo el caso de las SRs tipo delta, con envolvente de tipo gaussiano. Aparte del posible interés práctico del problema, el planteamiento de éste nos ha servido para desarrollar una técnica de renormalización de utilidad, por ejemplo, en el estudio de la transición localizado-deslocalizado en sistemas aperiódicos como los descritos por la ecuación de Harper. Finalmente, y desde un punto de vista algo más especulativo, hemos estudiado un modelo simple de transición metal-aislante que podría resultar útil para explicar los resultados contradictorios encontrados recientemente en experimentos de efecto Hall cuántico, que han mostrado discrepancias con la teoría convencional de *escala*. En este contexto, medidas de conductancia en SRGs pueden resultar de utilidad para verificar experimentalmente el modelo que hemos propuesto.

En el segundo capítulo nos hemos centrado en el estudio del desorden correlacionado en SRs con desorden intencionado. Es bien sabido que estos sistemas, debido a la existencia de correlaciones en el desorden, presentan estados deslocalizados. El principal resultado del capítulo ha sido la aplicación de una nueva técnica analítica al estudio de estados deslocalizados. Esta técnica es introducida y desarrollada en el caso de una aleación binaria y nos permite calcular la longitud de localización en un

entorno de la energía del estado extendido que aparece como consecuencia de las correlaciones en las energías de sitio que describen la aleación. Por otro lado, hemos estudiado también mediante esta técnica la existencia de estados extendidos en SRs semiconductoras de $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con desorden de tipo binario. Así, hemos obtenido expresiones analíticas para la posición de las distintas resonancias de transmisión que aparecen en dos modelos distintos de desorden correlacionado. Un estudio numérico de dichas resonancias nos ha permitido concluir que éstas aparecen a energías que se corresponden con estados extendidos del sistema. Por último hemos estudiado la aparición de estados extendidos en SRs diméricas en las que las correlaciones de tipo dimérico aparecen en la altura de las barreras. Una interesante propiedad de estas SRs es que, como hemos demostrado, presentan dos tipos de estados extendidos. El origen de estos dos tipos de estado se encuentra en las correlaciones de tipo dimérico en uno de los casos, y en la propia naturaleza binaria de la SR en el otro.

En el tercer capítulo hemos tratado el problema del transporte electrónico en heteroestructuras de semiconductores en las que una cierta cantidad de desorden no intencional está presente. El desorden no intencional aparece de diversas maneras, como en forma de rugosidad en la intercara de distintos materiales, como fluctuaciones en la fracción molar en uno de los componentes del material, etc. Para poder tratar este desorden, hemos resuelto la ecuación de Schrödinger bidimensional mediante un método de matriz de transferencia discreta. Hemos aplicado esta técnica al estudio del transporte en heteroestructuras semiconductoras de doble barrera, así como a SRs de puntos cuánticos autoensamblados. En el caso de la doble barrera hemos considerado desorden lateral (tanto correlacionado como no correlacionado), así como desorden composicional. De nuestros resultados se desprende que es mucho más acusado el efecto sobre el transporte del desorden lateral que el debido al desorden composicional. Por otro lado, al estudiar el desorden lateral correlacionado, hemos llegado a la interesante conclusión de que existen distintos

regímenes de transporte en función de la longitud de correlación del desorden lateral. En particular hemos mostrado cómo incluso en sistemas en los que las correlaciones son pequeñas, aunque no nulas (del orden del tamaño característico de la rugosidad en las intercaras), podemos ignorar dichas correlaciones obteniendo resultados muy precisos. Esto explicaría por qué muchos modelos teóricos en los que se admite la ausencia de correlaciones en la rugosidad han tenido éxito, a pesar de que las correlaciones están presentes en los sistemas físicos reales. En cuanto a las SRs de puntos cuánticos, hemos tenido en cuenta dos tipos de desorden que hemos llamado desorden configuracional y desorden morfológico. Nuestra conclusión principal en lo que se refiere al transporte en SRs de puntos cuánticos es que el efecto del desorden configuracional sobre el transporte electrónico es mucho menor que el del desorden morfológico. Este resultado es de interés, dado que proporciona una guía a la hora de construir este tipo de sistemas: se requiere un mayor control sobre la forma y tamaño de los puntos que sobre su disposición ordenada en la red. La técnica numérica que hemos utilizado a lo largo de este capítulo es bastante general. Esto hace que pueda ser empleada en el estudio de muy diversos sistemas físicos. En particular esperamos continuar el trabajo realizado en esta tesis estudiando sistemas de gran interés como los nanotubos o las moléculas artificiales de puntos cuánticos. Además esperamos incluir en nuestro estudio las interacciones a muchos cuerpos (interacción electrón-electrón), así como estudiar el transporte en presencia de campos magnéticos y campos de radiación dependientes del tiempo.

La localización electrónica en uniones magnéticas de semiconductores de intervalo estrecho de energías prohibidas ha sido el tema central del capítulo cuarto. Aquí hemos visto cómo en esta clase sistemas no son válidos los modelos más simples de una banda, de manera que hemos recurrido a modelos que incorporan el acoplamiento entre banda de conducción y de valencia. El principal resultado alcanzado ha sido la ob-

tención de las relaciones de dispersión para uniones magnéticas normales e invertidas. Hemos observado cómo en el caso de las uniones magnéticas los niveles de Landau son sustituidos por bandas de estados cuasidegenerados, y hemos llegado a la conclusión de que la conductancia en estos sistemas depende de forma no trivial del momento electrónico en la dirección normal al plano formado por la dirección del campo, y la dirección en la que éste presenta una discontinuidad. Finalmente hemos investigado las propiedades de espín de estos sistemas, llegando a la interesante conclusión de que la componente z del espín en una unión magnética invertida es una función distinta de cero en una región localizada en la dirección en la que el campo presenta la discontinuidad. Esto implica que las uniones magnéticas invertidas pueden considerarse como sistemas de espín cuasi-unidimensionales. Sin duda estos resultados son relevantes en el diseño de nuevos dispositivos en el marco de una ciencia de muy reciente aparición: la espintrónica.

APÉNDICE A

Relaciones de dispersión en uniones magnéticas

En este apéndice pretendemos explicar con algún detalle el cálculo de las relaciones de dispersión, tanto para la unión magnética invertida, como para la unión magnética normal, que han sido investigadas en el capítulo 6.

A.1. Unión magnética invertida

A cada uno de los lados de la unión magnética es posible escribir las dos soluciones independientes como sigue [150]

$$\Psi_1 = e^{i(k_y y + \chi_\zeta \zeta)} \begin{pmatrix} D_{p-1}(\xi) \\ D_{p-1}(\xi) \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [\chi_\zeta D_{p-1}(\xi) - i\sqrt{2}D_p(\xi)] \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [\chi_\zeta D_{p-1}(\xi) + i\sqrt{2}D_p(\xi)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

$$\Psi_2 = e^{i(k_y y + \chi_\zeta \zeta)} \begin{pmatrix} D_p(\xi) \\ -D_p(\xi) \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [-\chi_\zeta D_p(\xi) + i\sqrt{2}D_{p-1}(\xi)] \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [\chi_\zeta D_p(\xi) + i\sqrt{2}D_{p-1}(\xi)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

para $\xi \rightarrow \infty$, mientras que para $\xi \rightarrow -\infty$ las soluciones pueden escribirse de la siguiente forma

$$\bar{\Psi}_1 = e^{i(k_y y + \chi_\zeta \zeta)} \begin{pmatrix} D_{p-1}(-\xi) \\ -D_{p-1}(-\xi) \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [-\chi_\zeta D_{p-1}(-\xi) + i\sqrt{2}D_p(-\xi)] \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [\chi_\zeta D_{p-1}(-\xi) + i\sqrt{2}D_p(-\xi)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

$$\bar{\Psi}_2 = e^{i(k_y y + \chi_\zeta \zeta)} \begin{pmatrix} D_p(-\xi) \\ D_p(-\xi) \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [\chi_\zeta D_p(-\xi) - i\sqrt{2}D_{p-1}(-\xi)] \\ \frac{i\hbar v}{E-V+\Delta} [\chi_\zeta D_p(-\xi) + i\sqrt{2}D_{p-1}(-\xi)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

Dado que Ψ_1 y Ψ_2 , así como $\bar{\Psi}_1$ y $\bar{\Psi}_2$ son soluciones independientes a un lado y otro de la unión, una solución general a cada uno de estos lados se escribirá como una combinación lineal de estas soluciones, es decir

$$\Psi^+ = A \cdot \Psi_1 + B \cdot \Psi_2, \quad (\text{A.5})$$

a un lado de la unión, y

$$\Psi^- = \bar{A} \cdot \bar{\Psi}_1 + \bar{B} \cdot \bar{\Psi}_2, \quad (\text{A.6})$$

al otro. Si ahora imponemos la condición de que las soluciones Ψ^+ y Ψ^- sean iguales en la unión, es decir, en la región en la que el campo magnético presenta su discontinuidad, y suponemos que esta tiene lugar

en $x = 0$, entonces

$$A \cdot \Psi_1(\xi_0) + B \cdot \Psi_2(\xi_0) = \bar{A} \cdot \bar{\Psi}_1(\xi_0) + \bar{A} \cdot \bar{\Psi}_1(\xi_0), \quad (\text{A.7})$$

en donde $\xi_0 = \sqrt{2}x_0/l_H$. Definimos ahora el siguiente vector

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} A \\ B \\ \bar{A} \\ \bar{B} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

y a continuación la matriz \mathbf{M} , cuyos elementos vienen dados por

$$\begin{aligned} M_{11} &= D_{p-1}(\xi_0), \\ M_{12} &= D_p(\xi_0), \\ M_{13} &= -D_{p-1}(\xi_0), \\ M_{14} &= -D_p(\xi_0), \\ M_{21} &= D_{p-1}(\xi_0), \\ M_{22} &= -D_p(\xi_0), \\ M_{23} &= D_{p-1}(\xi_0), \\ M_{24} &= -D_p(\xi_0), \\ M_{31} &= \Omega \left[\chi_\zeta D_{p-1}(\xi_0) - i\sqrt{2}D_p(\xi_0) \right], \\ M_{32} &= \Omega \left[-\chi_\zeta D_p(\xi_0) + i\sqrt{2}pD_{p-1}(\xi_0) \right], \\ M_{33} &= \Omega \left[\chi_\zeta D_{p-1}(\xi_0) - i\sqrt{2}D_p(\xi_0) \right], \\ M_{34} &= \Omega \left[-\chi_\zeta D_p(\xi_0) + i\sqrt{2}pD_{p-1}(\xi_0) \right], \\ M_{41} &= \Omega \left[\chi_\zeta D_{p-1}(\xi_0) + i\sqrt{2}D_p(\xi_0) \right], \\ M_{42} &= \Omega \left[\chi_\zeta D_p(\xi_0) + i\sqrt{2}pD_{p-1}(\xi_0) \right], \\ M_{43} &= \Omega \left[-\chi_\zeta D_{p-1}(\xi_0) - i\sqrt{2}D_p(\xi_0) \right], \end{aligned}$$

$$M_{44} = \Omega \left[-\chi_\zeta D_p(\xi_0) - i\sqrt{2}pD_{p-1}(\xi_0) \right], \quad (\text{A.9})$$

siendo

$$\Omega = \frac{i\hbar v}{E - V + \Delta}. \quad (\text{A.10})$$

Con estas definiciones, podemos reescribir la ecuación (A.7) como sigue

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{w} = 0 \quad (\text{A.11})$$

de manera que sólo existe solución $\mathbf{w} \neq \mathbf{0}$ si se cumple que $\det(\mathbf{M}) = 0$. Esta última condición nos conduce directamente a la relación de dispersión para la unión magnética invertida

$$D_p^2(\xi_0) - pD_{p-1}^2(\xi_0) = 0. \quad (\text{A.12})$$

A.2. Unión magnética normal

En este caso las soluciones a cada lado de la unión pueden escribirse de la siguiente manera

$$\Psi_1 = e^{i\theta^+} \begin{pmatrix} D_{p-1}(\xi^+) \\ D_{p-1}(\xi^+) \\ K^+ [\chi^+ D_{p-1}(\xi^+) - i\sqrt{2}D_p(\xi^+)] \\ K^+ [\chi^+ D_{p-1}(\xi^+) + i\sqrt{2}D_p(\xi^+)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

$$\Psi_2 = e^{i\theta^+} \begin{pmatrix} D_p(\xi^+) \\ -D_p(\xi^+) \\ K^+ [-\chi^+ D_p(\xi^+) + i\sqrt{2}pD_{p-1}(\xi^+)] \\ K^+ [\chi^+ D_p(\xi^+) + i\sqrt{2}pD_{p-1}(\xi^+)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

para $\xi \rightarrow \infty$, mientras que para $\xi \rightarrow -\infty$ las soluciones pueden escribirse de la siguiente forma

$$\bar{\Psi}_1 = e^{i\theta^-} \begin{pmatrix} D_{q-1}(-\xi^-) \\ D_{q-1}(-\xi^-) \\ K^- [\chi^- D_{q-1}(-\xi^-) + i\sqrt{2}D_q(-\xi^-)] \\ K^- [\chi^- D_{q-1}(-\xi^-) - i\sqrt{2}D_q(-\xi^-)] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.15})$$

$$\bar{\Psi}_2 = e^{i\theta^-} \begin{pmatrix} D_q(-\xi^-) \\ -D_q(-\xi^-) \\ K^- [-\chi^- D_q(-\xi^-) - i\sqrt{2}qD_{q-1}(-\xi^-)] \\ K^- [\chi^- D_q(-\xi^-) - i\sqrt{2}qD_{q-1}(-\xi^-)] \end{pmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Aquí, θ^\pm , K^\pm , y χ^\pm son constantes que dependerán del valor del campo magnético y por tanto del valor de l_H^\pm a un lado u otro (\pm) de la unión. En concreto $K^\pm \propto 1/l_H^\pm$ mientras que $\chi^\pm \propto l_H^\pm$, de manera que podemos definir $K \equiv K^\pm \chi^\pm$. K será independiente del lado de la unión en que nos encontremos siempre que $\sqrt{q/p} = l_H^+/l_H^-$. Además definiremos $J^+ \equiv 1/l_H^+$ y $J^- \equiv 1/l_H^-$.

Construiremos en este caso una solución general al igual que como lo hicimos para la unión magnética invertida, es decir, a partir de combinaciones lineales de las soluciones independientes a cada uno de los lados de la unión. La matriz \mathbf{M} que aparece en (A.11) tiene los siguientes elementos en el caso de la unión magnética normal

$$\begin{aligned} M_{11} &= e^{i\theta^+} D_{p-1}(\xi_0^+), \\ M_{12} &= e^{i\theta^+} D_p(\xi_0^+), \\ M_{13} &= -e^{i\theta^-} D_{q-1}(-\xi_0^-), \\ M_{14} &= -e^{i\theta^-} D_q(-\xi_0^-), \\ M_{21} &= e^{i\theta^+} D_{p-1}(\xi_0^+), \\ M_{22} &= -e^{i\theta^+} D_p(\xi_0^+), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_{23} &= -e^{i\theta^-} D_{q-1}(-\xi_0^-), \\
M_{24} &= e^{i\theta^-} D_q(-\xi_0^-), \\
M_{31} &= e^{i\theta^+} \left[K D_{p-1}(\xi_0^+) - i\sqrt{2} J^+ D_p(\xi_0^+) \right], \\
M_{32} &= e^{i\theta^+} \left[-K D_p(\xi_0^+) + i\sqrt{2} J^+ p D_{p-1}(\xi_0^+) \right], \\
M_{33} &= -e^{i\theta^-} \left[K D_{q-1}(-\xi_0^-) + i\sqrt{2} J^- D_q(-\xi_0^-) \right], \\
M_{34} &= -e^{i\theta^-} \left[-K D_q(-\xi_0^-) - i\sqrt{2} J^- q D_{q-1}(-\xi_0^-) \right], \\
M_{41} &= e^{i\theta^-} \left[K D_{p-1}(\xi_0^+) + i\sqrt{2} J^+ D_p(\xi_0^+) \right], \\
M_{42} &= e^{i\theta^-} \left[K D_p(\xi_0^+) + i\sqrt{2} J^+ p D_{p-1}(\xi_0^+) \right], \\
M_{43} &= -e^{i\theta^+} \left[K D_{q-1}(-\xi_0^-) - i\sqrt{2} J^- D_q(-\xi_0^-) \right], \\
M_{44} &= -e^{i\theta^+} \left[K D_q(-\xi_0^-) - i\sqrt{2} J^- q D_{q-1}(-\xi_0^-) \right], \tag{A.17}
\end{aligned}$$

de manera que el sistema (A.11) sólo tiene solución distinta de la trivial cuando, al igual que antes, se cumpla que $\det(\mathbf{M}) = 0$. Finalmente la relación de dispersión para la unión magnética normal tras resolver el determinante

$$l_H^- D_{q-1}(-\xi_0^-) D_p(\xi_0^+) + l_H^+ D_q(-\xi_0^-) D_{p-1}(\xi_0^+) = 0. \tag{A.18}$$

Referencias

- [1] L. Esaki y R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [2] H. Kressel y J. K. Butler, *Semiconductor Lasers and Heterojunction LEDs*, (Academic, New York, 1977).
- [3] J. H. Luscombe, Nanotechnology **4**, 1 (1993).
- [4] F. Capasso y S. Datta, Physics Today, Febrero, 74 (1990)
- [5] C. Weisbuch y B. Vinter, *Quantum Semiconductor Structures*, (Academic Press, San Diego, 1991).
- [6] L. J. Challis, Contemporary Physics **33**, 111 (1992).
- [7] R. E. Prange y S. M. Girvin (editores), *The Quantum Hall Effect*, (Springer-Verlag, New York, 1987).
- [8] E. Abrahams, P. W. Anderson, P. Liccardello, y D. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [9] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
- [10] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, y D. S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
- [11] D. Fisher y P. A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [12] H. L. Engquist y P. W. Anderson, Phys. Rev. B **24**, 1151 (1981).
- [13] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [14] M. Büttiker, IBM J. Res. Dev. **32**, 63 (1988).
- [15] M. Büttiker, IBM J. Res. Dev. **32**, 317 (1988).

- [16] K. Leo, P. Haring, F. Brüggemann, R. Schwedler, y K. Köhler, Solid State Commun. **84**, 943 (1992).
- [17] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [18] N. F. Mott y W. D. Twose, Adv. Phys. **10**, 107 (1961).
- [19] D. H. Dunlap, H.-L. Wu, y P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [20] H.-L. Wu y P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991).
- [21] P. Phillips y H.-L. Wu, Science **252**, 1805 (1991).
- [22] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, y R. Gómez-Alcalá, Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999).
- [23] S. R. White y L. J. Sham, Phys. Rev. Lett. **47**, 879 (1981).
- [24] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981).
- [25] M. Altarelli, Phys. Rev. B **28**, 842 (1983).
- [26] J. H. Davies *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*, (Cambridge University, Cambridge, 1998).
- [27] A. Elçi, Phys. Rev. B **49**, 7432 (1994).
- [28] R. Landauer, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).
- [29] E. N. Economou y C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **46**, 618 (1981).
- [30] J. M. Ziman, J. Phys. C **2**, 1230 (1969).
- [31] H. Matsuda y K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Supp. **45**, 56 (1970).

- [32] J. M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, London, 1979).
- [33] B. Kramer y A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [34] A. P. Lee y T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [35] M. D. Stephens y J. L. Skinner, J. Chem. Phys. **177**, 727 (1993).
- [36] F. Domínguez-Adame, E. Diez, y A. Sánchez, Phys. Rev. B **51**, 8115 (1995).
- [37] A. Sánchez, E. Maciá, y F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **49**, 147 (1994).
- [38] A. Sánchez y F. Domínguez-Adame, J. Phys. A: Math. & Gen. **27**, 3725 (1994).
- [39] E. Diez, A. Sánchez, y F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **50**, 14 359 (1994).
- [40] F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, y E. Diez, Phys. Rev. B **50**, 17 736 (1994).
- [41] E. Diez, A. Sánchez, and F. Domínguez-Adame, IEEE J. Quantum Electron. **31**, 1919 (1995).
- [42] E. Diez, A. Sánchez, y F. Domínguez-Adame, Solid State Electron. **40**, 433 (1996).
- [43] P. D. Kirkman y J. B. Pendry, J. Phys. C: Solid State Phys. **17**, 4327 (1984).
- [44] T. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia, y B. I. Shraiman, Phys. Rev. A **33**, 1141 (1986).
- [45] M. Schreiber y H. Grussbach, Mod. Phys. Lett. B **6**, 851 (1992).

- [46] J. Canisius y J. L. van Hemmen, J. Phys. C **18**, 4873 (1985).
- [47] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, y A. Y. Cho, Science **264**, 553 (1994).
- [48] G. Scamarcio, F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco, y A. Y. Cho, Science **276**, 773 (1997).
- [49] Q. K. Yang y A. Z. Li, Physica E **4**, 239 (1999).
- [50] Q. K. Yang y A. Z. Li, J. Appl. Phys. **87**, 1963 (2000).
- [51] H. H. Tung y C. P. Lee, IEEE J. Quantum Electron. **32**, 507 (1996).
- [52] I. Gómez, F. Domínguez-Adame, E. Diez, y V. Bellani, J. Appl. Phys. **85**, 3916 (1999).
- [53] E. Diez, I. Gómez, F. Domínguez-Adame, R. Hey, V. Bellani, y G. B. Parravicini, Physica E **7**, 832 (2000).
- [54] F. Banfi, V. Bellani, I. Gómez, E. Diez, y F. Domínguez-Adame, Semicond. Sci. Technol. **16**, 304 (2001).
- [55] I. Gómez e I. Satija, Phys. Lett. A **268**, 128 (2000).
- [56] E. Diez, I. Gómez, y F. Domínguez-Adame, en preparación.
- [57] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R12 (1985).
- [58] C. Rauch, G. Strasser, K. Unterrainer, W. Boxleitner, y E. Gornik, Phys. Rev. Lett. **81**, 3495 (1998).
- [59] I. Gómez, F. Domínguez-Adame, A. Flitti, y E. Diez, Phys. Lett. A **48**, 431 (1998).
- [60] C. Sirtori, J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, y A. Y. Cho, Appl. Phys. Lett. **66**, 3242 (1996).

- [61] K. A. Mäder, L. -W. Wang, y A. Zunger, J. Appl. Phys. **78**, 6639 (1995).
- [62] C. B. Duke, *Tunneling in Solids*, (Academic, New York, 1969).
- [63] T. B. Boykin, Phys. Rev. B **51**, 4289 (1995).
- [64] F. Domínguez-Adame, B. Méndez, y E. Maciá, Semicond. Sci. Technol. **9**, 263 (1994).
- [65] L. Hedin y B. I. Lundqvist, J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, 2064 (1971).
- [66] J. V. Sokoloff, y J. V. José, Phys. Rev. Lett. **49**, 334 (1982).
- [67] H. P. Wei, D. C. Tsui, M. A. Paalanen, y A. M. M. Pruisken, Phys. Rev. Lett. **61**, 1294 (1988).
- [68] D. Shahar, M. Hilke, C. C. Li, D. C. Tsui, S. L. Sondhi, J. E. Cunningham, y M. Razeghi, Solid State Commun. **107**, 19 (1998).
- [69] R. T. F. van Schaijk, A. de Visser, S. M. Olsthoorn, H. P. Wei, y A. M. M. Pruisken, Phys. Rev. Lett. **84**, 1567 (2000).
- [70] D. C. Tsui, Rev. Mod. Phys. **71**, 891 (1999).
- [71] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, y D. Shahar, Rev. Mod. Phys. **69**, 315 (1997).
- [72] M. Lee, S. A. Solin, y D. R. Hines, Phys. Rev. B **48**, 11921 (1993).
- [73] P. W. Anderson, Phys. Rev. **23B**, 4828 (1981).
- [74] J. C. Flores, J. Phys. Condens. Matter **1**, 8471 (1989).
- [75] H.-L. Wu y P. Phillips, J. Chem. Phys. **93**, 7369 (1990).
- [76] A. Bovier, J. Phys. A: Math. & Gen. **25**, 1021 (1992).

- [77] H.-L. Wu, W. Goff, y P. Phillips, Phys. Rev. B **45**, 1623 (1992).
- [78] S. N. Evangelou y D. E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992).
- [79] P. K. Datta, D. Giri, y K. Kundu, Phys. Rev. B **47**, 10 727 (1993).
- [80] S. N. Evangelou y A. Z. Wang, Phys. Rev. B **47**, 13 126 (1993).
- [81] J. C. Flores y M. Hilke, J. Phys. A: Math. & Gen. **26**, L1255 (1993).
- [82] S. N. Evangelou, A. Z. Wang, y S. J. Xiong, J. Phys. Cond. Matter **6**, 4937 (1994).
- [83] P. K. Datta y K. Kundu, J. Phys. Cond. Matter **6**, 4465 (1994).
- [84] F. A. B. F. de Moura y M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998).
- [85] F. M. Izrailev y A. A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999).
- [86] A. Chomette, B. Deveaud, A. Regreny, y G. Bastard, Phys. Rev. Lett. **57**, 1464 (1986).
- [87] D. Sedrakyan, y A. Sedrakyan, Phys. Rev. B **60**, 10114 (1999).
- [88] F. Domínguez-Adame, I. Gómez, A. Avakyan, D. Sedrakyan, y A. Sedrakyan, phys. stat. sol. (b) **221**, 633 (2000).
- [89] T. Hakobyan, D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, I. Gómez y F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **61**, 11432 (2000).
- [90] I. Gómez, F. Domínguez-Adame, y E. Diez, Phys. B **324**, 235 (2002).
- [91] V. I. Oseledec, Trans. Moscow Math. Soc. **19**, 197 (1968).

- [92] H. Fidder, J. Knoester, y D. A. Wiersma, J. Chem. Phys. **95**, 7880 (1991).
- [93] E. Erdős y R. C. Herndon, Adv. Phys. **31**, 65 (1982).
- [94] A. Abrikosov, Solid State Commun. **37**, 997 (1981).
- [95] V. Melnikov, Sov. Phys. Solid State **23**, 444 (1981).
- [96] G. G. Kozlov, V. A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, y A. Rodríguez, Phys. Rev. B **58**, 5367 (1998).
- [97] E. Maciá y F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. Lett. **76**, 2957 (1996).
- [98] K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **53**, 77 (1973).
- [99] M. Hilke y J. C. Flores, Phys. Rev. B **55**, 10625 (1997).
- [100] A. Wacker, S. Bose, C. Rauch, G. Strasser, y E. Gornik, Superlattices and Microstructures, **20**, 1 (1996).
- [101] A. Wacker, A. Jauho, S. Rott, A. Markus, P. Binder, y H. Döler, Phys. Rev. Lett. **83**, 836 (1999).
- [102] F. Domínguez-Adame, E. Diez y J. Devís, Recent Res. Devel. Quantum Electronics **1**, 137 (1999).
- [103] G. Klimeck, R. Lake, y D. Blanks, Phys. Rev. B **58**, 7279 (1998).
- [104] U. Penner, H. Rücker, y I. N. Yassievich, Semicond. Sci. Technol. **13**, 709 (1998).
- [105] P. Pereyra, Phys. Rev. Lett. **80**, 2677 (1998).
- [106] P. H. Bagwell, Phys. Rev. B **41**, 10354 (1990).
- [107] L. E. Henrickson, K. Hirakawa, J. Frey, y T. Ikoma, J. Appl. Phys. **71**, 3883 (1992).

- [108] V. D. Freilikher y S. A. Gradeskul, Prog. Opt. **30**, 137 (1991).
- [109] I. Gómez, E. Diez, F. Domínguez-Adame, y P. Orellana, Physica E, (en prensa) (2002).
- [110] I. Gómez, E. Diez, F. Domínguez-Adame, y P. Orellana Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **692** (2002).
- [111] I. Gómez, F. Domínguez-Adame, E. Diez y P. Orellana, J. Appl. Phys. **92**, 4486 (2002).
- [112] T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannenwald, C. D. Parker, y D. D. Peck, Appl. Phys. Lett. **43**, 588 (1984).
- [113] B. Ricco y M. Ya. Azbel, Phys. Rev. B **29**, 1970 (1984).
- [114] N. S. Wingreen, K. W. Jacobsen, y J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **61**, 1396 (1988).
- [115] W. Cai, T. F. Zheng, P. H. Hu, B. Yudanin, y M. Lax, Phys. Rev. Lett. **63**, 418 (1989).
- [116] V. A. Chitta, C. Kutter, R. E. M. de Bekker, J. C. Maan, S. J. Hawksworth, J. M. Chamberlain, M. Henini, y G. Hill, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 3945 (1994).
- [117] J. Iñarrea, G. Platero, y C. Tejedor, Semicond. Sci. Technol. **9**, 515 (1994).
- [118] A. Levy Yeyati, F. Flores, y E. V. Anda, Phys. Rev. B **47**, 10 543 (1993).
- [119] P. Orellana y F. Claro, Appl. Phys. Lett. **75**, 1643 (1999).
- [120] P. Orellana, F. Claro, y E. Anda, Phys. Rev. B **62**, 9959 (2000).

- [121] R. M. Feenstra, D. A. Collins, D. Z. -Y. Ting, M. W. Wang, y T. C. McGill, Phys. Rev. Lett. **72**, 2749 (1994).
- [122] H. W. Salemik, O. Albrektsen, y P. Koenraad, Phys. Rev. B **45**, 6946 (1992).
- [123] S. Gwo, K. -J. Chao, C. K. Shih, K. Sandra, y B. G. Streetman, Phys. Rev. Lett. **71**, 1883 (1993).
- [124] M. Jergel, V. Holý, E. Majková, Š. Luby, R. Senderák, H. J. Stock, D. Menke, U. Kleineberg, y U. Heinzmann, Physica B **253**, 28 (1998).
- [125] A. L. Barabási y H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [126] M. Castro, tesis doctoral, Universidad Complutense (2001).
- [127] J. L. Liu, W. G. Wu, A. Balandin, G. L. Jin, y K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **74**, 185 (1999).
- [128] J. L. Liu, W. G. Wu, A. Balandin, G. L. Jin, Y. H. Luo, S. G. Thomas, y K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **75**, 1745 (1999).
- [129] I. Tanaka, I. Kamiya, H. Sasaki, N. Qureshi, S. J. Allen, y P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. **74**, 844 (1999).
- [130] P. C. Sharma, K. W. Alt, D. Y. Yeh, y K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **75**, 1273 (1999).
- [131] G. Springholz, V. Holy, M. Pinczolits, y G. Bauer, Science **282**, 734 (1998).
- [132] O. L. Lazarenkova y A. A. Balandin, J. Appl. Phys. **89**, 5509 (2001).
- [133] O. L. Lazarenkova y A. A. Balandin, Phys. Rev. B **66**, 245319 (2002).

- [134] P. D. Ye, D. Weiss, R. R. Gerhardts, M. Seeger, K. von Klitzing, K. Eberl, y H. Nickel, Phys. Rev. Lett. **74**, 3013 (1995).
- [135] A. Matulis, F. M. Peeters, y P. Vasilopoulos, Phys. Rev. Lett. **72**, 1518 (1992).
- [136] V. M. Ramaglia, A. Tiaglicozzo, F. Ventriglia, y G. P. Zucchelli, Phys. Rev. B **43**, 2201 (1991).
- [137] F. M. Peeters y P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **47**, 1466 (1993).
- [138] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2020 (1989).
- [139] A. Nogaret, S. Carlton, B. L. Gallagher, P. C. Main, M. Henini, R. Wirtz, R. Newbury, M. A. Howson, y S. P. Beaumont, Phys. Rev. B, **55**, R16037 (1997).
- [140] I. S. Ibrahim y F. M. Peeters, Phys. Rev. B **52**, 17321 (1995).
- [141] F. Evers, A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, y P. Wolfle, Phys. Rev. B **60**, 8951 (1999).
- [142] D. B. Chklovskii y P. A. Lee, Phys. Rev. B **48**, 18060 (1993).
- [143] D. B. Chklovskii, Phys. Rev. B **51**, 9895 (1995).
- [144] M. Abramowitz e I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, (Dover, Nueva York, 1970).
- [145] J. E. Müller, Phys. Rev. Lett. **68**, 385 (1992).
- [146] S. Datta, *Electron Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University, Cambridge, 1995).
- [147] F. M. Peeters, J. Reijniers, S. M. Badalian, y P. Vasilopoulos, Microelectronic Engineering **47**, 405 (1999).

-
- [148] D. Agassi y V. Korenman, Phys. Rev. B **37**, 10095 (1988).
- [149] N. Malkova, I. Gómez, y F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **63**, 035317 (2001).
- [150] D. Agassi, Phys. Rev. B **49**, 10393 (1994) 10393.
- [151] P. M. Petroff, A. Lorke, y A. Imamoglu, Physics Today, Mayo (2001).

